

Relativistische Quantenmechanik

Georg Wolschin

<http://wolschin.uni-hd.de>

UNIVERSITÄT HEIDELBERG
INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK



Vorlesung im Sommersemester 2014

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Verbindung zur nichtrelativistischen Quantenmechanik	11
3	Klein-Gordon Gleichung	15
3.1	Eigenschaften der KGE	16
3.2	Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern; Eichinvarianz	18
3.3	Hamiltonsche Form der KGE	21
3.4	KGE im Coulomb-Potential	22
3.5	Oszillator-Coulomb-Potential	27
4	Dirac-Gleichung	31
4.1	Einleitung	31
4.2	Forderungen an die Gleichung; Ableitung der DE	32
4.3	Eigenschaften der Dirac-Matrizen:	33
4.4	Dirac-Gleichung in kovarianter Form	35
4.5	Lösungen der freien DE	36
4.6	Kopplung an das elektromagnetische Feld	37
5	Invarianzen der Dirac-Gleichung	45
5.1	Lorentz-Kovarianz	45
5.2	Paritätstransformation P	49
5.3	Ladungskonjugations-Transformation C	52
5.4	Zeitumkehr-Transformation T	57
6	Lösung der Dirac-Gleichung mit Zentralpotential	63
7	Das Kleinsche Paradoxon	72
8	Dirac-Neutrinos: Die Weyl-Gleichung	79
8.1	Introduction to Neutrinos	79
8.2	Die Weyl-Gleichung	81
9	Grundzüge der Quantenelektrodynamik	85
9.1	Einführung	85
9.2	Quantisierung des freien em. Feldes	88

10 Elemente der relativistischen Streutheorie	96
10.1 Invarianten bei relativistischen Reaktionen	96
11 Aufgaben zur RQM-Vorlesung	99
12 Literatur	104

1 Einleitung

Nichtrelativistische QM:

beruht auf der Schrödinger-Gleichung (SE): Ableitung via Korrespondenzprinzip aus dem **Hamilton-Formalismus** der klassischen Mechanik.

- Die SE ist Galilei-invariant (wie die Hamilton-Funktion)
- gültig nur für $v \ll c$

Relativistische QM

$$\left. \begin{array}{l} \bullet v \leq c \\ \bullet \text{ Wechselwirkung von Licht und Materie} \\ \bullet E_{WW} \geq mc^2 \Rightarrow \text{Teilchenerzeugung} \end{array} \right\} \text{ Lorentz-Invariante Theorie}$$

erfordern Feldquantisierung $\Rightarrow$ „**Quantenfeldtheorie**“

Relativistische Wellengleichungen

beschreiben Teilchen in einem vorgegebenen Kraftfeld -insbesondere dem elektromagnetischen Feld-, das zunächst noch nicht quantisiert wird.

Die Wellengleichung soll dem „**Korrespondenzprinzip**“¹ genügen, und für Teilchen mit **Spin** in nichtrelativistischer Näherung die **Pauli-Gleichung** ergeben.

Historisch war die erste relativistische Wellengleichung die „**Klein-Gordon-Gleichung**“ (KGE)

E. Schrödinger, Annalen Phys. **81**, 109 (1926),

W. Gordon, Z. Physik **40**, 117 (1926),

O. Klein, Z. Physik **41**, 407 (1927).

Sie beschreibt **Mesonen** mit Spin 0, z.B. Pionen. Wegen negativen Wahrscheinlichkeitsdichten (siehe Kapitel 3) wurde sie zunächst verworfen und erst später als Grundlage von Feldtheorien für **skalare Mesonfelder** etabliert.

Erst die von **Paul Dirac** aufgestellte Gleichung (DE) beschreibt Teilchen mit Spin 1/2 (Fermionen, speziell das Elektron):

¹klassische Größen werden durch **Operatoren** ersetzt

P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A117, 610 (1928) (DE).

Wie die KGE hat die DE Lösungen mit negativer Energie. Dirac hat deshalb 1930 postuliert, dass diese Zustände alle besetzt sind, so dass für Fermionen (Pauli-Prinzip!) keine Übergänge möglich sind.

„**Löcher**“ in diesem „**Dirac-See**“ entsprechen **Antiteilchen** mit entgegengesetzter Ladung:

P.A.M. Dirac, „A theory of electrons and protons“, Proc. Roy. Soc. **A126**, 360 (1930).

[zunächst hielt man das Proton für das Antiteilchen des Elektrons: Dirac versuchte zunächst die Massendifferenz e/p auf die Wechselwirkung mit dem See zurückzuführen].

H. Weyl zeigte jedoch, dass die Löchertheorie vollständig **symmetrisch** für negative/positive Ladungen ist, Dirac modifizierte daraufhin seine Theorie und **postulierte** 1931 das **Positron**

P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A133**, 60-72 (1931).

Es wurde 1932 von **Carl Anderson** entdeckt und beseitigte die Zweifel an der DIRAC-Theorie:

C.D. Anderson, Science **76**, 238-239 (1932).

In der **Relativistischen Quantenmechanik** bleiben die Axiome der Quantentheorie ungeändert; es wird jedoch der Hamilton-Operator modifiziert:

- Der **Zustand** eines Systems wird durch einen **Zustandsvektor** in einem linearen Raum - dem **Hilbertraum** - beschrieben, $|\psi\rangle$.
- **Observable** werden durch **hermitesche Operatoren** dargestellt.
- Der **Mittelwert** einer Observablen im Zustand $|\psi\rangle$ beschrieben, $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$ („Erwartungswert“).
- Bei einer **Messung von A** geht der ursprüngliche Zustand in den **Eigenzustand** $|n\rangle$ von A mit **Eigenwert** a_n über, $A |n\rangle = a_n |n\rangle$.

Es folgt eine Einführung in die verwendete Notation, dann untersuchen wir die Eigenschaften der Klein-Gordon und Dirac-Gleichung mit der Interpretation als Einteilchen-Wellengleichung. Die Lösungen sind auch Basiszustände bei der Entwicklung der Feldoperatoren.

Notation: Einheiten

Die Grundgleichungen werden mit $\hbar, c$ eingeführt, später setzen wir $\hbar \equiv c \equiv 1$, so dass die Zeit die Dimension einer Länge hat, Energien, Impulse und Massen haben die Dimensionen einer inversen Länge; Ladungen werden dimensionslos

$$e^2 = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137} \quad \left[\begin{array}{c} 1/137.035999679(94) \\ \text{für } Q^2=0; \text{ bei } Q^2=m_w^2; \alpha \approx 1/128 \end{array} \right]$$

$$\text{mit } \hbar = \frac{h}{2\pi} \cong 6.582 \cdot 10^{-22} \text{ MeVs}$$

Koordinaten:

Zeitpunkt t und ein Punkt im Ortsraum $\vec{r} = (x, y, z)$ definieren einen Raum-Zeit-Punkt (x^0, x^1, x^2, x^3) mit $x^0 = ct$ Zeitkoordinate, $x^1 = x$, $x^2 = y$, $x^3 = z$ Raumkoordinaten.

Die Indizes 0, 1, 2, 3 kennzeichnen Komponenten von Vierervektoren, (griech. Buchstaben $\mu, \nu, \dots$), 1, 2, 3 die Komponenten des gewöhnlichen Raumes (lat. Buchstaben $i, k, l, \dots$):

$$x^\mu \equiv (x^0, x^k) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3)$$

$$(\mu = 0, 1, 2, 3) \quad (k = 1, 2, 3)$$

Metrischer Tensor, ko- und kontravariante Indices.

Die Metrik im Raum-Zeit-Kontinuum ist durch den metrischen Tensor definiert

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$g_{00} = 1, \quad g_{kk} = -1, \quad g_{\mu\nu} = 0 \quad \forall \mu \neq \nu$$

Man unterscheidet sogenannte

„kovariante“ Vektoren (a_μ): transformieren wie $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$

„kontravariante“ Vektoren (a^μ): transformieren wie x^μ

$\Rightarrow$ unterschiedliche Vorzeichen der räumlichen Komponenten. Umwandlung durch Anwendung des metrischen Tensors:

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu, \text{ so dass}$$

$$a_0 = a^0, \quad a_k = -a^k$$

Einsteinsche Summenkonvention:

über doppelt erscheinende Indices wird summiert:

$$\Rightarrow a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$$

$$\Rightarrow \text{Hinaufziehen der Indices: } a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu$$

$$\text{mit } g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$$

Es ist $g_\mu{}^\nu = g_{\mu\sigma} g^{\sigma\nu} = g^\mu{}_\nu = \delta_\mu{}^\nu$

$$\text{mit dem Kronecker-Symbol } \delta_\mu{}^\nu = \begin{cases} 1, & \mu = \nu \\ 0, & \mu \neq \nu \end{cases}$$

Dreier- und Vierervektoren, Skalarprodukt

Für Dreiervektoren im gewöhnlichen Ortsraum verwenden wir $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$, so dass

$$a^\mu = (a^0, a^1, a^2, a^3) = (a^0, \vec{a}) \quad \text{mit } a^1 = a_x, \quad a^2 = a_y, \quad a^3 = a_z$$

Skalarprodukt/Betrag 3er Vektor:

$$a = (\vec{a} \cdot \vec{a})^{1/2} = [a_x^2 + a_y^2 + a_z^2]^{1/2}$$

Oft wird beim 4er Vektor der Index $^\mu$ weggelassen $\Rightarrow (a)$, wenn eine Verwechslung mit dem Betrag des 3er Vektors ausgeschlossen ist.

Das Skalarprodukt zweier 4er Vektoren a^μ, b^μ erhält man durch „Verjüngung“ aus den jeweiligen ko- und kontravarianten Komponenten:

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \vec{a} \cdot \vec{b}$$

$$s^2 \equiv a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - a^2 \quad \text{ist die Norm von } a \equiv a^\mu$$

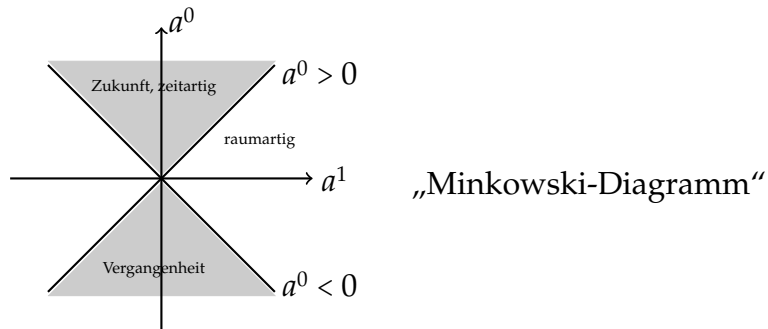
Klassifizierung der 4er Vektoren

$$a_\mu a^\mu < 0, \quad a^\mu \quad \text{raumartig}$$

$$a_\mu a^\mu = 0, \quad a^\mu \quad \text{Nullvektor (lichtartig)}$$

$$a_\mu a^\mu > 0, \quad a^\mu \quad \text{zeitartig}$$

Dies entspricht der Lage des Vektors relativ zum Lichtkegel



Gradient, Differentialoperatoren

$$\vec{\nabla} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \text{Nabla-Operator}$$

$$\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Die vier partiellen Differentialoperatoren $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ bilden einen kovarianten Vektor:

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \equiv \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \vec{\nabla} \right), \quad \text{Gradientenoperator.}$$

Der entsprechende kontravariante Gradient ist

$$\partial^\mu \equiv g^{\mu\nu} \partial_\nu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right).$$

Der d'Alembert-Operator ist

$$\square \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = \partial_\mu \partial^\mu.$$

$\varepsilon^{\mu\nu\lambda\varrho}$ -Tensor (Levi-Civita Tensor)

ein in den vier Indices total antisymmetrischer Tensor:

$$\varepsilon^{\mu\nu\lambda\varrho} = \begin{cases} +1, & (\mu\nu\lambda\varrho) \text{ gerade Permutation von } (0,1,2,3) \\ 0, & \text{mindestens zwei gleiche Indices} \\ -1, & (\mu\nu\lambda\varrho) \text{ ungerade Permutation von } (0,1,2,3) \end{cases}$$

Elektromagnetisches Feld

Das elektromagnetische Potential besteht aus einem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$, und einem skalaren Potential $\phi(\vec{r}, t)$, die einen Vierervektor bilden:

$$(A^\mu) \equiv (\phi, \vec{A}); \quad (j^\mu) = (c\rho, \vec{j}) \quad \text{mit} \quad \partial_\mu j^\mu = 0$$

$$\text{Elektrisches Feld:} \quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial x^0}$$

$$\text{Magnetisches Feld:} \quad \vec{B} = \text{rot} \vec{A} \equiv \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Die Komponenten von $\vec{E}$ und $\vec{B}$ bilden einen antisymmetrischen Tensor $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ Raum-Zeit-Kontinuum:

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu,$$

so dass (im Vakuum)

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}; \quad \text{Sp}(F^{\mu\nu}) = 0$$

⇒ Inhomogene Maxwell-Gleichungen:

$$\boxed{\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu}; \quad \text{in Lorenz-Eichung } \partial_\mu A^\mu = 0 \Rightarrow \boxed{\partial_\mu \partial^\mu A^\nu = \frac{4\pi}{c} j^\nu}$$

Homogene Maxwell-Gleichungen:

$$\boxed{\partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} = 0} \quad \text{mit} \quad \tilde{F}^{\mu\nu} := \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\lambda\varrho} F_{\lambda\varrho}$$

Lorentz-Transformation (LT)

Beim Wechsel des Bezugssystems durch LT werden die Koordinaten **linear** und **reell** so transformiert, dass das Quadrat des Abstandes zweier Raum-Zeit-Punkte erhalten bleibt.

$$\boxed{x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu}$$

Der reelle Vektor a^μ ist eine einfache Translation der Raum-Zeit Achsen. **Homogene LT** mit $a^\mu = 0$:

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$$

Definition der LT durch ($\Lambda^{\mu\nu} = g^{\lambda\sigma} \Lambda^\mu{}_\sigma \Lambda^\nu{}_\lambda$)

(1) $\Lambda_{\mu\nu}^* = \Lambda_{\mu\nu}$ **reelle** Transformation

(2) $\Lambda_{\mu\nu} \Lambda^{\mu\lambda} = \Lambda_{\nu\mu} \Lambda^{\lambda\mu} = \delta_\nu{}^\lambda$ **Erhaltung des Abstandsquadrates**

$\Rightarrow \det|\Lambda^\mu{}_\nu| = \pm 1$ (+1: „eigentliche“ LT; Richtungssinn der Raumachsen bleibt gleich)

Inverse Transformation: $x^\mu = x'^\nu \Lambda_\nu{}^\mu$

Die (homogene) **Lorentz-Gruppe** ist die Gruppe der **linearen reellen** Transformation, bei denen die Skalarprodukte zwischen Vierervektoren erhalten bleiben.

2 Verbindung zur nichtrelativistischen Quantenmechanik

In der nichtrelativistischen QM wird die Zeitentwicklung von Zuständen $|\psi\rangle$ durch die **Schrödinger-Gleichung** (SE) bestimmt:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle} \quad (SE)$$

Für ein freies Teilchen in Ortsdarstellung, $\langle \vec{r} |$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 \psi(\vec{r}, t).$$

- (1) Wegen der unterschiedlichen Ordnungen der zeitlichen und räumlichen Ableitungen ist die SE **nicht Lorentz-kovariant** ($\hat{=}$ relativistisch invariant gegenüber LT): ihre Struktur ändert sich beim Übergang von einem Inertialsystem durch LT in ein anderes.
- (2) Die SE beschreibt nicht den Eigendrehimpuls eines Teilchens, z.B. den Spin des Elektrons. Für nichtrelativistische Elektronen lässt sich dieser Mangel durch das „Rezept“ von **W.Pauli** beheben: Z.Physik **43**, 601 (1927): Die Wellenfunktion ψ wird durch eine zweikomponentige Wellenfunktion ersetzt,

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

mit $|\psi_i(\vec{r}, t)|^2 d^3r$, $i = 1, 2$: Wahrscheinlichkeit, das Teilchen mit Spin in positiver ($i = 1$) oder negativer ($i = 2$) z -Richtung im Volumenelement d^3r um den Punkt $\vec{r}$ zu finden.

Der Drehimpulsoperator $\vec{j}$ setzt sich aus den Operatoren $\vec{L}$ des Bahndrehimpulses, und $\vec{\sigma}/2$ des Spins zusammen:

$$\vec{j} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \text{Gesamtdrehimpuls-Operator}$$

$$\text{mit } \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma^1 \\ \sigma^2 \\ \sigma^3 \end{pmatrix}.$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}, \quad \text{Bahndrehimpuls-Operator.}$$

Mit den „Paulischen Spinmatrizen“

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die so modifizierte Schrödinger-Theorie ist jedoch **nicht relativistisch invariant**. Ziel ist deshalb, eine relativistisch invariante Gleichung zu finden, die den Spin „automatisch“ mit berücksichtigt.

Zum Aufstellen von relativistischen oder nicht relativistischen Wellengleichungen benutzt man das **Korrespondenzprinzip**, d.h. klassische Größen werden durch Operatoren ersetzt:

$$\begin{aligned} E &\longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = -i\hbar \vec{\nabla} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich aus der nichtrelativistischen Energie eines freien Teilchens

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

die freie zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} |\psi\rangle.$$

In der **speziellen Relativitätstheorie** transformieren sich Energie E und Impuls $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ als Komponenten eines kontravarianten Vierervektors

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right) = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right)$$

mit den kovarianten Komponenten

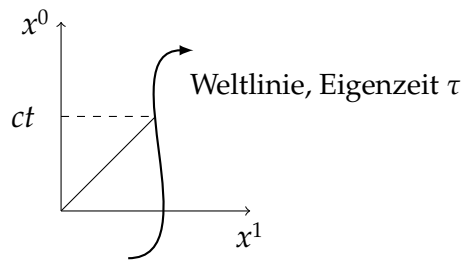
$$p_\mu = g_{\mu\nu} p^\nu = \left(\frac{E}{c}, -\vec{p} \right)$$

⇒ das invariante Skalarprodukt ist

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2, \quad \text{mit der Ruhemasse } m.$$

Ableitung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung

„Weltlinie“ eines Teilchens in Parameterdarstellung: Ort eines klassischen relativistischen Punktteilchens der Masse $m > 0$ im Minkowski-Raum



$$x(t) = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{x}(t) \end{pmatrix} \text{ mit der Zeit } t \text{ im Inertialsystem.}$$

Eigenzeit τ als Parameter auf der Weltlinie: die Zeit, die eine mit dem Teilchen bewegte Uhr anzeigt. Im momentanen Ruhesystem des Teilchens gilt für das Differential der Weltlinie

$$dx' = \begin{pmatrix} cd\tau \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Mit der Invarianz des relativistischen Abstandsquadrats ist

$$(dx')^2 = c^2 d\tau^2 = (dx)^2 = c^2 dt^2 - (d\vec{x})^2 = c^2 dt^2 \left(1 - \frac{v^2(t)}{c^2} \right)$$

$$\text{mit } \vec{v}(t) = \frac{d\vec{x}}{dt}(t)$$

Der Zusammenhang zwischen τ und t wird

$$\tau = \int_{t_0}^t dt' \sqrt{1 - \frac{v^2(t')}{c^2}}; \quad \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

4er Geschwindigkeit u und **4er Impuls** p sind definiert durch

$$u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} = \begin{pmatrix} c \frac{dt}{d\tau} \\ \frac{d\vec{x}}{d\tau} \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{v}/c \end{pmatrix}, \quad \left(\text{Nebenrechnung: } \frac{d\vec{x}}{d\tau} = \frac{d\vec{x}}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \frac{\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right)$$

$$p^\mu \equiv mu^\mu = m \cdot \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{mc}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{v}/c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E/c \\ \vec{p} \end{pmatrix}$$

Im **nichtrelativistischen Grenzfall** $v \ll c$ gehen diese Ausdrücke in die gewöhnlichen Formeln für Energie und Impuls über - jedoch muss die Ruheenergie berücksichtigt

werden:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \xrightarrow{v \ll c} 1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots$$
$$\Rightarrow \frac{E}{c} \longrightarrow mc + \frac{1}{2} mc \frac{v^2}{c^2} \Rightarrow \boxed{E \rightarrow mc^2 + \frac{1}{2} mv^2}$$
$$\vec{p} \rightarrow m\vec{v}.$$

Das **invariante Skalarprodukt** für den 4er Impuls ergibt demnach

$$\boxed{p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

3 Klein-Gordon Gleichung

Wenden wir das Korrespondenzprinzip

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}; \quad p^\mu \rightarrow i\hbar \partial^\mu$$

$$\left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \rightarrow i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right)$$

auf die relativistische Energie-Impuls-Beziehung an,

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4},$$

erhalten wir die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4} |\psi\rangle$$

Die Wurzel bringt jedoch Probleme: ihre Entwicklung ergibt ∞ hohe Ableitungen, Ort und Zeit treten also unsymmetrisch auf und die relativistische Invarianz wird **gebrochen**.

Wir gehen deshalb von der quadratischen Relation aus,

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

und erhalten

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} |\psi\rangle = (-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4) |\psi\rangle$$

mit jeweils 2. Ableitung in Ort und Zeit. Division durch $-(\hbar^2 c^2)$ ergibt die offensichtlich Lorentz-kovariante Form

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] |\psi\rangle = 0$$

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad x^\mu = (x^0 = ct, \vec{x})$$

denn aus der Elektrodynamik ist bekannt, dass der **d'Alembertoperator**

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 = g^{\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x^\nu \partial x^\nu}$$

invariant gegenüber LT ist.

In der Wellengleichung erscheint die reduzierte Compton-Wellenlänge des Teilchens mit Masse m ,

$$\frac{\hbar}{mc} \equiv \lambda_c \quad [\lambda_c \cong 3.86 \cdot 10^{-13} \text{m}]$$

Man nennt die von Schrödinger, Gordon und Klein aufgestellte Gleichung

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] |\psi\rangle = 0 \quad \text{freie Klein-Gordon-Gleichung, (KGE)}$$

E. Schrödinger hat sie 1926 als relativistische Verallgemeinerung der SE vorgeschlagen, O. Klein und W. Gordon haben sie im Detail untersucht.

Mit dem 4er Impuls als Operator $p^\mu \triangleq i\hbar\partial^\mu$ lässt sie sich auch schreiben als

$$[p_\mu p^\mu - m^2 c^2] |\psi\rangle = 0$$

3.1 Eigenschaften der KGE

Sie erfüllt die **Kontinuitätsgleichung**; zur Herleitung aus der KGE bildet man

$$\psi^* \left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0$$

und subtrahiert die komplex konjugierte Gleichung,

$$\begin{aligned} \psi \left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi^* &= 0 \\ \Rightarrow \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* &= 0 \\ \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) &= 0 \end{aligned}$$

Damit die Stromdichte der nichtrelativistischen entspricht, multiplizieren wir mit $\frac{\hbar}{2mi}$;

$$\partial_\mu \equiv \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \right] + \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] = 0$$

Dies hat die Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho}_s + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_s = 0, \text{ mit der Dichte}$$

$$\varrho_s = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right], \text{ und der Stromdichte}$$

$$\vec{j}_s = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*].$$

bzw. in kovarianter Notation mit $j^\mu \equiv (c\varrho, \vec{j})$, 4er Stromdichte: $\partial_\mu j^\mu = 0$

In relativistischer Formulierung ist die **Normierung** meist so gewählt, dass

$$j_{\text{KG}}^\mu \equiv -i\hbar c^2 (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*), \quad \varrho_{\text{KG}} = i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right),$$

so dass der Energie-Eigenzustand

$$\psi = \Psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \varrho_{\text{KG}} = 2E |\Psi|^2,$$

und $|\Psi| = 1$ entspricht $2E$ Teilchen pro Einheitsvolumen.

Die Verbindung zum „Schrödinger-Strom“ ist dann

$$\vec{j}_s = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{1}{2mc^2} \vec{j}_{\text{KG}}$$

und $\vec{j}_s$ hat $\frac{E}{mc^2}$ Teilchen pro Einheitsvolumen für $|\Psi| = 1$.

Als Folge der **2. Zeitableitung** in der KGE ist jedoch ϱ nicht positiv definit, und daher keine Wahrscheinlichkeitsdichte, sondern evtl. $e \cdot \varrho(\vec{x}, t)$ eine **Ladungsdichte**.

(Bei einer DGL 2. Ordnung wie der KGE können die Anfangswerte von ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ **unabhängig** voneinander vorgegeben werden, so dass $\varrho(\vec{x})$ positiv oder negativ sein kann).

Freie Lösungen der KGE

Es existieren zwei freie Lösungen in Form von ebenen Wellen:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-i(Et - \vec{p}\vec{x})/\hbar}$$

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Es treten **positive** und **negative** Energien auf. Die Energie ist **nicht** nach unten beschränkt. Die Theorie ist **skalar**, sie enthält keinen Spin und könnte nur Mesonen mit

Spin 0 (z.B. π^0) beschreiben. Als Quantenfeldtheorie beschreibt die KGE Mesonen; das hermitesche skalare Klein-Gordon Feld beschreibt **neutrale** Mesonen mit Spin 0, siehe **QFT-Vorlesung**.

Im Rahmen der RQM lässt sich das KGE-Problem negativer Energien ($\hat{=}$ Massen im feldfreien Fall) umgehen, indem man die Interpretation des 4er Vektors j^μ ändert:

$$j^\mu \rightarrow ej^\mu(x) \equiv \textbf{Stromdichte} - \text{Vierervektor, d.h. insbesondere}$$

$$\varrho \rightarrow e\varrho(x) \equiv \text{elektrische Ladungsdichte; } \varrho \text{ nicht positiv definit}$$

Die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

beschreibt dann die **Ladungserhaltung**, während die Teilchenzahl nicht erhalten ist. [W. Pauli; V. Weisskopf, Helv. Phys. Acta 7, 709 (1934)].

$\Rightarrow$ es können Teilchenpaare mit entgegengesetzter Ladung erzeugt und vernichtet werden. Mit dieser Interpretation ist die KGE keine Einteilchen-Theorie mehr, sondern eine „Theorie der Ladung“.

(Erst mit der Dirac-Theorie kann eine **positiv definite Dichte** für ein Teilchen eingeführt werden; auch dort bleiben jedoch negative Energien, so dass die Einteilchen-Interpretation nur begrenzt möglich ist).

3.2 Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern; Eichinvarianz

Die WW eines relativistischen Spin-0-Teilchens mit einem elektromagnetischen Feld wird in der KGE wie in der SE durch „**minimale Kopplung**“ berücksichtigt:

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \\ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \end{aligned} \right\} p^\mu \rightarrow p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu$$

mit der Ladung e des bestehenden Teilchens, und dem elektromagnetischen Viererpotential

$$A^\mu = \begin{pmatrix} A^0 \\ \vec{A} \end{pmatrix}, \quad A^0 = \phi$$

Damit wird die KGE mit elektromagnetischen Feld:

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right)^2 - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m^2 c^4 \right] |\psi\rangle = 0$$

bzw. in kovarianter Form (Massenterm $m^2 c^2$!)

$$\left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) - m^2 c^2 \right] |\psi\rangle = 0$$

Die **Maxwellschen Gleichungen** sind invariant unter lokalen Eichtransformationen der Art

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$$

bzw.

$$A^\mu \rightarrow A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \chi$$

mit $\chi = \chi(x)$ eine beliebige reelle skalare Funktion der Raumzeit-Koordinaten.

Diese **lokale Eichinvarianz** lässt sich wie in der nichtrelativistischen Theorie auf die KGE übertragen, indem man die Wellenfunktion ψ durch Multiplikation einer Phase geeignet mittransformiert:

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{i\Lambda(x)} \psi(x)$$

Um $\Lambda(x)$ zu finden, setzen wir die gestrichenen Größen in die KGE ein und finden:

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu - \frac{e}{c} \partial_\mu \chi \right) \left(p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu - \frac{e}{c} \partial^\mu \chi \right) - m^2 c^2 \right] \cdot \psi' e^{-i\Lambda} \\ &= \left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu - \frac{e}{c} \partial_\mu \chi \right) e^{-i\Lambda} \left(p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu - \frac{e}{c} \partial^\mu \chi + \hbar \partial^\mu \Lambda \right) - m^2 c^2 e^{-i\Lambda} \right] \psi' \\ &= e^{-i\Lambda} \left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu - \frac{e}{c} \partial_\mu \chi + \hbar \partial_\mu \Lambda \right) \left(p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu - \frac{e}{c} \partial^\mu \chi + \hbar \partial^\mu \Lambda \right) - m^2 c^2 \right] \psi' \end{aligned}$$

⇒ Mit der Wahl

$$\Lambda(x) = \frac{e}{\hbar c} \chi(x) \quad \text{geht dies in die Form der KGE über,}$$

$$\left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu \right) \left(p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu \right) - m^2 c^2 \right] \psi' = 0 \quad (\text{Beweis durch Nachrechnen})$$

Da physikalische Observable durch Erwartungswerte $\langle \psi | \dots | \psi \rangle$ dargestellt werden, spielt ein gemeinsamer gleicher Phasenfaktor $\Lambda(x)$ in ψ keine Rolle: die KGE mit

minimaler Kopplung ist deshalb unter lokalen Eichtransformationen des elektromagnetischen Feldes invariant.

Kontinuitätsgleichung mit Feld:

Multipliziert man die KGE mit Feld von links mit $\langle \psi^* |$ und subtrahiert davon das komplex konjugierte, folgt die Kontinuitätsgleichung als

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varrho(x)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x) &= 0 \quad \text{mit} \\ \varrho(x) &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right] - \frac{e}{mc^2} A^0 \psi^* \psi \\ \vec{j}(x) &= -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] - \frac{e}{mc} \vec{A} \psi^* \psi\end{aligned}$$

(wieder mit dem Faktor $\frac{\hbar}{2mi'}$ analog zur nichtrel. QM) bzw. in Lorentz-kovarianter Form

$$\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0} \quad \text{mit} \quad (j^\mu) = \begin{pmatrix} c\varrho \\ \vec{j} \end{pmatrix},$$

$$\boxed{j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*] - \frac{e}{mc} A^\mu \psi^* \psi}$$

oder in „relativistischer“ Normierung $j_{\text{KG}} = 2mc^2 j_s$:

$$j_{\text{KG}}^\mu = -i\hbar c^2 [\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*] - 2ce A^\mu \psi^* \psi$$

Aus der Kontinuitätsgleichung folgt durch Integration über den gesamten Raum der **Erhaltungssatz**

$$\boxed{Q = \int d^3x \varrho(x) = \text{const}} \Rightarrow \text{Ladungserhaltung.}$$

Jedoch ist wieder $\varrho(x)$ **nicht positiv definit**, da ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial t} \forall t$ willkürliche Werte annehmen können, so dass ϱ und $\vec{j}$ nicht als Wahrscheinlichkeitsgrößen interpretiert werden können.

$\Rightarrow$ Suche nach einer relativistischen Wellengleichung von **erster Ordnung** in der Zeit, und mit **positiv definiter** Wahrscheinlichkeitsdichte: DIRAC-Gleichung. Sie hat allerdings - wie die KGE - Lösungen mit **negativen Energieeigenwerten**.

3.3 Hamiltonsche Form der KGE

Die KGE (DGL 2.Ordnung) lässt sich in ein System von gekoppelten DGLn **erster Ordnung** überführen („Schrödniger-artige“ Form) durch die Ersetzungen (ψ Lösung der KGE)

$$\psi = \phi + \varphi, \quad (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0)\psi = mc^2(\phi - \varphi)$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \phi = \frac{1}{2mc^2} \left(mc^2 + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right) \psi$$

$$\varphi = \frac{1}{2mc^2} \left(mc^2 - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + eA^0 \right) \psi$$

$$\Rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right) (\phi + \varphi) = mc^2(\phi - \varphi)$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right) (\phi - \varphi) = \left[\frac{1}{m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + mc^2 \right] (\phi + \varphi)$$

Addition und Subtraktion dieser Gleichungen ergibt ein gekoppeltes DGL-System 1.Ordnung

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 (\phi + \varphi) + (mc^2 + eA^0)\phi$$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 (\phi + \varphi) - (mc^2 - eA^0)\varphi$$

und mit $\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$ folgt die KGE in Hamiltonscher Form,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi}$$

$$\boxed{H = \frac{\sigma_3 + i\sigma_2}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \sigma_3 mc^2 + eA^0}$$

(H ist nicht hermitesch, da $i\sigma_2$ nicht hermitesch ist!:($i\sigma_2 = -(i\sigma_2)^+$)

mit den Pauli-Matizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für die Lösungen der **freien KGE** folgt

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_0 \Psi, \quad H_0 = \frac{\sigma_3 + i\sigma_2}{2m} \vec{p}^2 + \sigma_3 mc^2$$

mit dem Lösungsansatz

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} e^{i(\vec{p}\vec{x} - Et)/\hbar} \\ \Psi_{\vec{p}}^{(1)}(x) &= \begin{pmatrix} mc + p_0 \\ mc - p_0 \end{pmatrix} e^{-ip_\mu x^\mu / \hbar} \\ \Psi_{\vec{p}}^{(2)}(x) &= \begin{pmatrix} mc - p_0 \\ mc + p_0 \end{pmatrix} e^{+ip_\mu x^\mu / \hbar} \end{aligned}$$

Da H nicht hermitesch ist, gibt es keine positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte mit erhaltener Gesamt-Wahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \psi \rangle &= \int d^3x \Psi^+ \psi \\ \langle \Psi | \mathcal{O} | \psi \rangle &= \int d^3x \Psi^+ \mathcal{O} \psi \quad (\mathcal{O} \text{ linearer Operator}) \\ \langle \Psi | \mathcal{O} | \psi \rangle &= \langle \psi | \mathcal{O} | \Psi \rangle^* \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= H\Psi, \quad i\hbar \Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi^+ H\Psi \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \Psi &= (H\Psi)^+ \Psi = (\Psi^+ H\Psi)^* \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | H - H^+ | \Psi \rangle \neq 0 \end{aligned}$$

Aufgrund der Nicht-Hermitezität von $H (\neq H^+)$ sind seine Eigenzustände i.a. **nicht orthogonal**, und e^{iH} ist **nicht unitär** $\Rightarrow$ Heisenberg- und Schrödinger-Bild ergeben unterschiedliche Resultate.

3.4 KGE im Coulomb-Potential

Die KGE mit elektromagnetischem Feld war

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right)^2 - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m^2 c^4 \right] \psi = 0$$

Für zeitunabhängiges $\vec{A}, \phi$ sind die stationären Lösungen mit positiver Energie

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(\vec{x}), \quad E > 0$$

⇒ zeitunabhängige KGE

$$(E - eA^0)^2 \varphi - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \varphi - m^2 c^4 \varphi = 0$$

Für ein sphärisch symmetrisches Potential wie das Coulomb-Feld

$$A^0(\vec{x}) \rightarrow A^0(r), \quad r = |\vec{x}|, \quad \text{und} \quad \vec{A} = 0 \text{ folgt}$$

$$\boxed{(-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4) eA^0(\vec{x}) = [E - eA^0(r)]^2 \varphi(\vec{x})}$$

Wie in der nichtrelativistischen QM wird die Gleichung durch Separationsansatz gelöst; in sphärischen Polarkoordinaten

$$\varphi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad \text{mit Kugelfunktionen } Y_{lm}$$

⇒ Radialgleichung:

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = \frac{(E - eA^0(r))^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} R(r)$$

Betrachte zunächst den **nichtrelativistischen Grenzfall**:

$$E = mc^2 + E'; \quad E' - eA^0 \ll mc^2$$

⇒ nichtrelativistische radiale Schrödingergleichung, denn die rechte Seite der Radialgleichung wird

$$\frac{1}{\hbar^2 c^2} [(mc^2)^2 + 2mc^2(E' - eA^0(r)) + (E' - eA^0(r))^2 - m^2 c^4] R(r) \approx \boxed{\frac{2m}{\hbar^2} [E' - eA^0(r)] R(r)}$$

mit der nichtrelativistischen Energie E' .

Für ein π^- **Meson im Coulombfeld eines Kerns mit Ladungszahl Z**:

$$m_{\pi^-} = 139.57 \text{ MeV}/c^2 \cong 273 m_e$$

mittlere Lebensdauer $\tau_{\pi^-} \cong 2.60 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ vs. klassische „Umlaufzeit“ τ aus der Unschärferelation:

$$\Delta \times \Delta p \equiv a_{\pi} m_{\pi} \frac{a_{\pi}}{\tau} \cong \hbar; \quad a_{\pi} \cong \frac{m_e}{m_{\pi}} a_B \cong \frac{1}{273} 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cong 1.8 \cdot 10^{-13} \text{ m} \cong 180 \text{ fm}$$

$$\Rightarrow \tau \cong \frac{m_{\pi} a_{\pi}^2}{\hbar} \cong \frac{139.180^2}{197.33} \cdot \frac{1}{3 \cdot 10^{23}} \text{ s} \Rightarrow \tau \cong 7.6 \cdot 10^{-20} \text{ s} \ll \tau_{\pi^-} \cong 2.6 \cdot 10^{-8} \text{ s}$$

$\hbar \equiv c \equiv 1 : \text{ MeV fm} \cong 1/197.33; 1 \text{ s} \cong 3 \cdot 10^{23} \text{ fm} \Rightarrow$ Trotz der endlichen π^- -Lebensdauer gibt es wohldefinierte stationäre Energiezustände.

Das Coulombpotential des Kerns ist

$$\boxed{eA^0(r) = -\frac{Ze^2}{r}}$$

und mit der Feinstrukturkonstanten $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ wird die Radialgleichung

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \frac{d}{dr} r + \frac{l(l+1) - Z^2 \alpha^2}{r^2} - \frac{2Z\alpha E}{\hbar c r} - \frac{E^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \right] R = 0$$

Substituiere: $\sigma^2 = \frac{4(m^2 c^4 - E^2)}{\hbar^2 c^2}$, $\gamma = Z\alpha$, $\lambda = \frac{2E\gamma}{\hbar c \sigma}$; $\varrho = \sigma r$

$\Rightarrow$ kompakte Form der Radialgleichung für die neue Variable ϱ :

$$\left[\frac{d^2}{d(\varrho/2)^2} + \frac{2\lambda}{\varrho/2} - 1 - \frac{l(l+1) - \gamma^2}{(\varrho/2)^2} \right] \varrho R(\varrho) = 0$$

Das ist die Gestalt der nichtrelativistischen SE für die Funktion $u \equiv \varrho R$, wenn wir ersetzen

$$\varrho_0 \rightarrow 2\lambda \quad (\varrho_0 = \sqrt{\frac{2m}{|E|} \cdot \frac{Ze^2}{\hbar}})$$

$$l(l+1) \rightarrow l(l+1) - \gamma^2 \equiv l'(l'+1) \quad (l' \text{ i.a. nicht ganzzahlig})$$

(Auch in der klassischen relativistischen Mechanik findet sich eine solche Änderung des Zentrifugalterms; dort sind die elliptischen Kepler-Bahnen nicht mehr geschlossen, sondern werden zu Rosettenbahnen).

Die Radialgleichung wird analog zum nichtrelativistischen Fall gelöst:

$$R(\rho) = \begin{cases} \left(\frac{\rho}{2}\right)^{l'} & \rho \rightarrow 0 \\ e^{-\rho/2} & \rho \rightarrow \infty \end{cases}$$

$\Rightarrow$ Lösungsansatz:

$$\varrho R(\varrho) = \left(\frac{\varrho}{2}\right)^{l'+1} e^{-\varrho/2} w(\varrho/2)$$

mit der DGL für $w(\varrho)$ analog zum Schrödingerfall:

$$\left[\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\overbrace{l'(l'+1)}^{l(l+1)-\gamma^2}}{\varrho^2} + \frac{\overbrace{\varrho_0}^{2\lambda}}{\varrho} - 1 \right] \overbrace{u(\varrho)}^{\varrho R(\varrho)} = 0$$

$$(\varrho R(\varrho) = u(\varrho) = \varrho^{l'+1} e^{-\varrho/2} w(\varrho))$$

$$\varrho \frac{d^2 w}{d\varrho^2} + 2(l'+1 - \varrho) \frac{dw}{d\varrho} + (\varrho_0 - 2(l'+1))w = 0$$

Lösung durch Potenzreihenansatz

$$w(\varrho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k.$$

Die aus der DGL folgende Rekursionsrelation ergibt eine Funktion $w(\varrho) \propto e^{2\varrho}$. Damit $R(\varrho)$ normierbar bleibt, muss die Reihe abbrechen.

Einsetzen ergibt:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1)\varrho^{k-1} + 2(l'+1)k\varrho^{k-1} - 2k\varrho^k + (\varrho_0 - 2(l'+1))\varrho^k] = 0$$

Die Koeffizienten jeder Potenz von ϱ müssen Null sein, also für ϱ^k :

$$[(k+1)k + 2(l'+1)(k+1)]a_{k+1} + [-2k + (\varrho_0 - 2(l'+1))]a_k = 0$$

$\Rightarrow$ Rekursionsrelation zur Berechnung von a_{k+1} aus a_k :

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l'+1) - \varrho_0}{(k+1)(k+2l'+2)} \cdot a_k$$

Für die Konvergenz ist das Verhältnis $\frac{a_{k+1}}{a_k}$ für $k \rightarrow \infty$ relevant:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2}{k}$$

Vergleich mit der Exponentialreihe

$$e^{2\varrho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (2\varrho)^k$$

mit den aufeinander folgenden Koeffizienten

$$\frac{2^{k+1}/(k+1)!}{2^k/k!} = \frac{2}{k+1} \cong \frac{2}{k}$$

d.h. die Reihe für $w(\varrho)$ verhält sich wie $e^{2\varrho}$. Damit nicht $u(\varrho) \propto e^{-\varrho} w(\varrho) \rightarrow e^{\varrho}$ für große r resultiert, (sonst ist $u(\varrho)$ nicht normierbar) muss die Reihe **abbrechen**.

Bricht die Reihe nach dem N -ten Glied ab, ist $w(\varrho)$ ein Polynom N -ten Grades. Die Abbruchbedingung

$$a_{N+1} + a_{N+2} = \dots = 0, \quad \text{ergibt die Rekursionsrelation}$$

$$\boxed{\varrho_0 = 2(N+l'+1)}, \quad N = 0, 1, 2, \quad \text{radiale Quantenzahl}$$

$$\text{mit } \varrho_0 \rightarrow 2\lambda \Rightarrow \boxed{\lambda = N+l'+1} \quad (\text{bis auf } l' \text{ analog zum Schrödingerfall})$$

Zur Bestimmung der Energieeigenwerte eliminieren wir σ :

$$\sigma = \frac{2E\gamma}{\hbar c \lambda} \Rightarrow \sigma^2 = \frac{4E^2\gamma^2}{\hbar^2 c^2 \lambda^2} = \frac{4(m^2 c^4 - E^2)}{\hbar^2 c^2}$$

und erhalten die Energieneaus

$$E = mc^2 \left(1 + \frac{\gamma^2}{\lambda^2} \right)^{-1/2}$$

(positive Wurzel, da $\sigma > 0$, $\lambda > 0 \Rightarrow E > 0$)

$\Rightarrow$ Für verschwindende Anziehung $\gamma = Z\alpha \rightarrow 0$ geht die Energie dieser Lösungen gegen die Ruheenergie,

$$E \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} mc^2$$

Berechnung von l' aus der Definitionsgleichung

$$l'(l' + 1) = l(l + 1) - \gamma^2$$

$$l' = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{(l + 1/2)^2 - \gamma^2}$$

nur „+“ zulässig, damit die kinet. Energie endlich bleibt

$$E_{Nl} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{[N + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 - \gamma^2}]^2}}}$$

In nichtrelativistischer Notation ist die Hauptquantenzahl $n = N + l + 1$; damit wird E ($n = 1, 2, \dots; l = 0, 1, \dots, n - 1$)

$$E_{nl} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{[n - (l + 1/2) + \sqrt{(l + 1/2)^2 - \gamma^2}]^2}}}$$

Die in der nichtrelativistischen Theorie vorhandene **Entartung** bezüglich des Drehimpulses ist hier **aufgehoben**.

Entwicklung der Energie in eine Potenzreihe ergibt

$$E = mc^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4} \left(\frac{n}{l + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + O(\gamma^6) \right]$$

$$E = \underbrace{mc^2}_{\text{Ruheenergie}} - \underbrace{\frac{R_y}{n^2}}_{\substack{\text{nichtrel.} \\ \text{Rydberg-} \\ \text{Energie}}} - \underbrace{\frac{R_y \gamma^2}{n^3} \left(\frac{1}{l + 1/2} - \frac{3}{4n} \right)}_{\text{relativistische Korrektur}} + O(R_y \gamma^4)$$

mit

$$R_y = \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{2} = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \quad (= 13.6\text{eV} \text{ für } Z = 1, m = m_e)$$

Die relativistische Korrektur hebt die **Entartung in l auf**:

$$E_{l=0} - E_{l=n-1} = -\frac{4R_y\gamma^2}{n^3} \frac{n-1}{2n-1}.$$

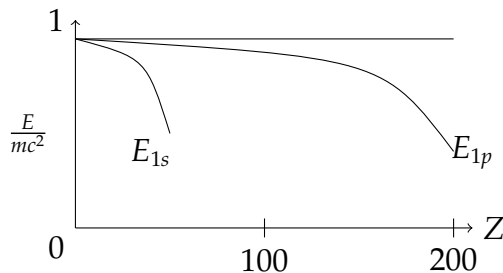
Damit l' und die Energieeigenwerte **reell** sind, muss (siehe Ausdruck für l') gelten

$$l + \frac{1}{2} > Z\alpha$$

Für s -Zustände mit $l = 0$ bedeutet das

$$Z < \frac{1}{2\alpha} \cong \frac{137}{2} = 68.5; \text{ für } l = 1, Z < 205.5$$

für größere Z wird das System instabil, die Lösungen zum Coulomb-Potential für $Z > 68$ unsinnig. Reale Kerne haben jedoch einen endlichen Radius (keine Punktladung), für den Bindungszustände auch für $Z > 68.5$ existieren.



Beim Vergleich mit **realen pionischen Atomen** muss demnach:

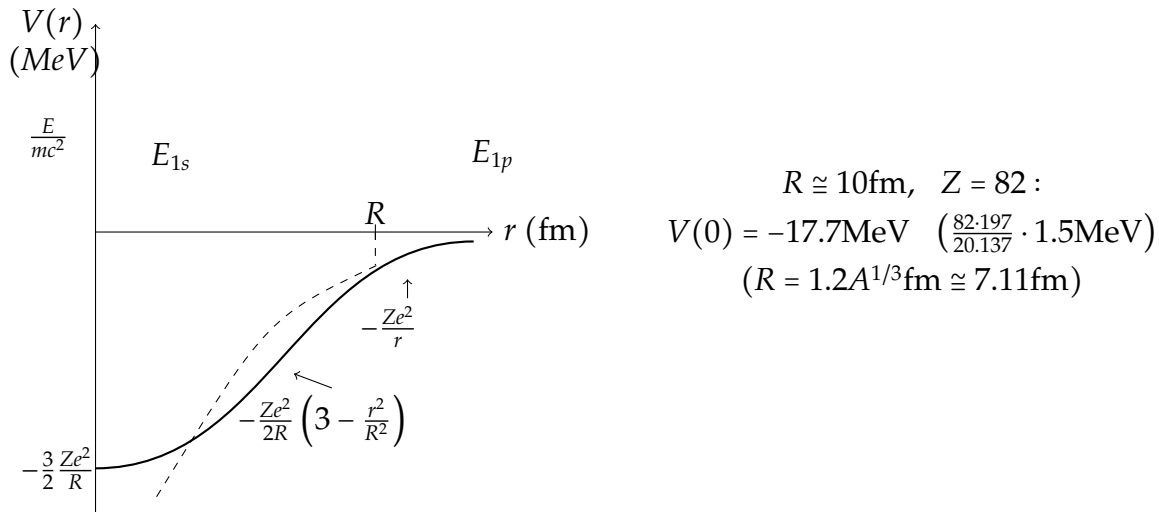
- Der endliche Kernradius berücksichtigt werden
- Die Masse m_π durch die reduzierte Masse ersetzt werden, $\mu = \frac{m_\pi \cdot M}{m_\pi + M}$
- Die Vakuumpolarisation muss berücksichtigt werden (virtuelle Elektron-Positron-Paare)
- Die starke WW Pion-Kern muss abgeschätzt werden.

3.5 Oszillator-Coulomb-Potential

Die endliche Ausdehnung des Kerns, die auch für $Z > 68.5$, $l = 0$ Bindungszustände ermöglicht, lässt sich durch ein Oszillator-Coulomb-Potential berücksichtigen.

Wir betrachten dazu den Kern näherungsweise als homogen geladene Kugel, mit Potential

$$eA^0(r) = V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} \right); & r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r}; & r > R \end{cases}$$



Die Radialgleichung wird auch für dieses Potential durch Potenzreihenansatz gelöst (siehe z.B. A.Wachter, Relativistische QM, Springer, pp. 82-87). Es ergibt sich ein nahezu linearer Zusammenhang zwischen den Zustandsenergien E und der Kernladungszahl Z , und es existieren auch für große Z - und kleine l -Werte gebundene Zustände.

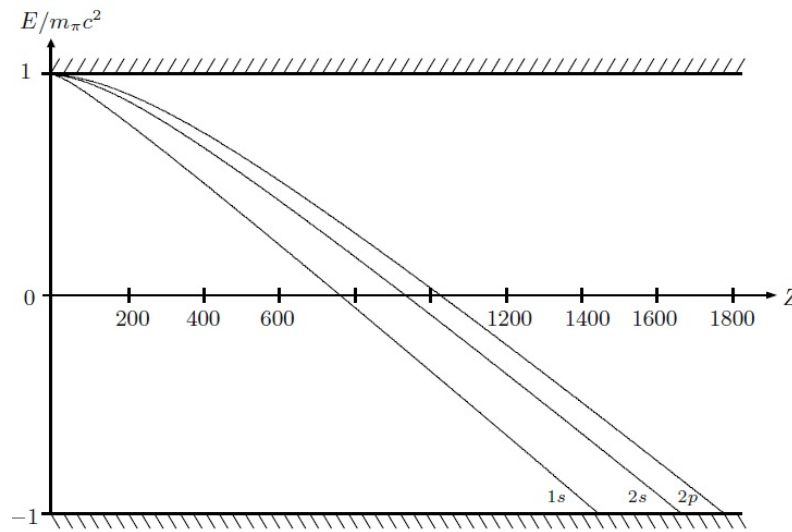


Abbildung 1: Energiewerte gebundener $1s$ -, $2s$ - und $2p$ -Pionzustände im Feld einer homogen geladener Kugel (Oszillator-Coulomb-Potential) als Funktion von Z . Der Kugelradius (Kernradius) beträgt $R = 10$ fm.

In Tabelle 1 sind für zwei verschiedene Kernladungszahlen Z der V -Erwartungswert des $1s$ -Pionradius, $\langle r \rangle_V$, das elektrostatische Oszillator-Coulomb-Potential V an der Stelle $\langle r \rangle_V$, die Bindungsenergie $E_B = E_{1s} - m_\pi c^2$ sowie die mittlere quadratische Abweichung $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle_V - \langle r \rangle_V^2}$ angegeben. Vergleicht man diese Werte mit der Ruheenergie $m_\pi c^2 = 139.577$ MeV des Pions und seiner Compton-Wellenlänge $\lambda_\pi = 1.414$ fm, so folgt für den **schwachen Bindungsfall**

$$Z = 2: \quad |E_B|, |V(\langle r \rangle_V)| \ll m_\pi c^2, \quad \Delta r \gg \lambda_\pi.$$

Tabelle 1: Kennzahlen des gebundenen $1s$ -Pionzustandes im Oszillator-Coulomb-Potential für den schwachen ($Z = 2$) und starken ($Z = 1450$) Bindungsfall.

	$Z = 2$	$Z = 1450$
$\langle r \rangle_V$	146.4 fm	3.7 fm
$V(\langle r \rangle_V)$	-0.02 MeV	-298.9 MeV
E_B	-0.05 MeV	-278.8 MeV
Δr	84.3 fm	1.6 fm

Bei starker Bindung: sei $Z = 1450$:

$$|E_B|, |V(\langle r \rangle_V)| \ll m_\pi c^2, \Delta r \gg \lambda_\pi$$

$\Rightarrow$ Einteilchenkonzept nicht mehr gültig!

Eine direkte Bestätigung dieser Feststellung ergibt sich durch die Betrachtung der radialen Ladungsdichte des $1s$ -Pionzustandes,

$$r^2 \rho(r) = \frac{E - V(r)}{m_\pi c^2} u_l^2(r).$$

Im schwachen Bindungsfall ($Z = 2$) ist E positiv, und die radiale Ladungsdichte ist, wie gewünscht, positiv definit. Demgegenüber besitzt die radiale Ladungsdichte im starken Bindungsfall ($Z = 1450$) aufgrund des zugehörigen negativen Energiewertes keinen einheitlichen Verlauf und geht ab $r \approx 15$ fm in negative Werte über, was mit dem Ein-Teilchenkonzept unvereinbar ist (siehe Abbildung 1). Die physikalische Bedeutung dieses Vorzeichenwechsels in starken Feldern (wie auch beim Kastenpotential und Potentialtopf) läßt sich letztlich nur im Rahmen von Quantenfeldtheorien richtig verstehen, wo die Teilchenzahl variabel ist.

(aus: [A.Wachter, Relativistische Quantenmechanik, Springer 2005; Seiten 85-86.](#))

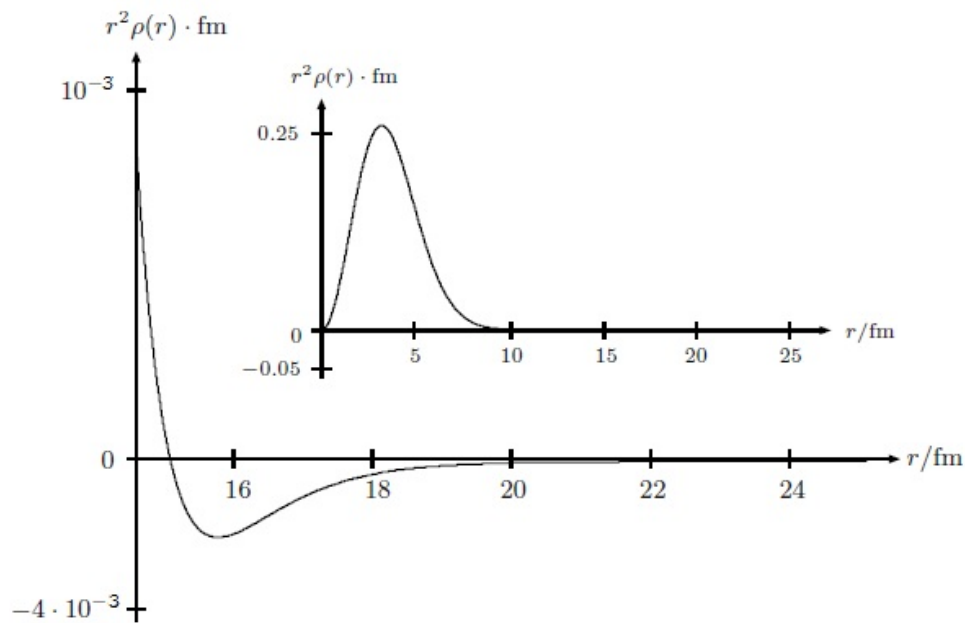


Abbildung 2: V-normierte radiale Ladungsdichte des 1s-Pionzustandes im Oszillator-Coulomb-Potential mit $Z = 1450$ und $R = 10$ fm. Die große Grafik zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der kleinen Grafik. Bei $r \approx 15$ fm wechselt die Ladungsdichte ihr Vorzeichen.

4 Dirac-Gleichung

4.1 Einleitung

Um die mit der KGE verbundenen Schwierigkeiten zu vermeiden - insbesondere nicht positiv-definite Dichte -, suchte P.Dirac nach einer in den zeitlichen und örtlichen Ableitungen **linearen** Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_D \psi$$

mit dem DIRAC-Operator

$$H_D = \frac{\hbar c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta mc^2 \equiv c \vec{\alpha} \vec{p} + \beta mc^2,$$

der bei korrekter Wahl von α^k , ($k = 1, 2, 3$) und β die DE ergibt (summiere über doppelte Indices!).

Da die Gleichung von 1.Ordnung in der Zeit ist, bleibt die **Dichte positiv**; wegen der Forderung **relativistischer Invarianz** dürfen dann auch die **räumlichen Ableitungen** nur von 1.Ordnung sein.

Damit H_D **hermitesch** ist ($H_D = H_D^\dagger$) müssen α^k und β hermitesche $N \times N$ Matrizen sein. (nicht einfach Zahlen, da die Gleichung dann nicht forminvariant bei räumlichen Drehungen ist).

$$\Rightarrow \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \text{ ist ein } n\text{-komponentiger Spalten-Vektor.}$$

4.2 Forderungen an die Gleichung; Ableitung der DE

- (1) Die Komponenten $\psi_1, \dots, \psi_N$ von ψ müssen die **KGE erfüllen**, so dass ebene Wellen als Lösungen die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ erfüllen.
 - (2) $\exists$ **erhaltener** Viererstrom, dessen nullte Komponente eine positive Dichte ist; es gilt die Kontinuitätsgleichung.
 - (3) Die Gleichung muss Lorentz-kovariant sein:
- (1), (2), (3) $\Rightarrow$ DIRAC-Gleichung.

Konsequenzen dieser Bedingungen:

zu (1) : zweimalige Anwendung von H_D ergibt

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \psi + \frac{\hbar m c^3}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i \psi + \beta^2 m^2 c^4 \psi$$

(der erste Term auf der rechten Seite der oberen Gleichung werde wegen $\partial_i \partial_j = \partial_j \partial_i$ symmetrisiert).

Division durch $(\hbar^2 c^2)$ und Vergleich mit der KGE,

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0$$

ergibt drei Bedingungen an die α^k, β :

$$(*) \quad \left. \begin{aligned} \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i &= 2\delta^{ij} \cdot \mathbb{I} \\ \alpha^i \beta + \beta \alpha^i &= 0 \\ (\alpha^i)^2 &= \beta^2 = \mathbb{I} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{Forderungen an die algebraische Struktur der DIRAC-Matrizen.}$$

zu (2) : Definiere den zu ψ adjungierten Zeilenvektor $\psi^+ \equiv (\psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$.

Multipliziere die DE von links mit ψ^+

$$\Rightarrow i\hbar\psi^+ \frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{\hbar c}{i}\psi^+ \alpha^k \partial_k \psi + mc^2 \psi^+ \beta \psi.$$

Die dazu komplex konjugierte Relation wird

$$-i\hbar \cdot \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar c}{i} (\partial_k \psi^+) \alpha^{k+} \psi + mc^2 \psi^+ \beta^+ \psi$$

und die Differenz beider Gleichungen multipliziere mit $(-i/\hbar)$ ergibt

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi = \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \right):$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi = -c \left[(\partial_k \psi^+) \alpha^{k+} \psi + \psi^+ \alpha^k \partial_k \psi \right] + \frac{imc^2}{\hbar} (\psi^+ \beta^+ \psi - \psi^+ \beta \psi) \quad (**)$$

Damit dieser Ausdruck die Form einer Kontinuitätsgleichung erhält,

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \varrho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0},$$

müssen die Matrizen α^k, β hermitesch sein:

$$(\alpha^k)^+ = \alpha^k; \quad \beta^+ = \beta \Rightarrow \text{letzter Term in } (**) \text{ fällt weg,}$$

und mit der Dichte

$$\varrho \equiv \psi^+ \psi \equiv \sum_{n=1}^N \psi_n^* \psi_n, \quad \text{und der Stromdichte}$$

$$j^k \equiv c\psi^+ \alpha^k \psi, \quad j^0 \equiv c\varrho$$

ist die KG erfüllt; in kovarianter Form mit $j^\mu \equiv (j^0, j^k),, \quad k = 1, 2, 3$

$$\Rightarrow \boxed{\partial_\mu j^\mu \equiv \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} j^0 + \frac{\partial}{\partial x^k} j^k = 0}.$$

4.3 Eigenschaften der Dirac-Matrizen:

Die Matrizen α^k, β antikommutieren:

$$\{\alpha^k, \beta\} = 0; \quad \text{ihr Quadrat ist } \mathbb{I}:$$

$$(\alpha^k)^2 = \beta^2 = \mathbb{I} \Rightarrow \text{Eigenwerte } \pm 1.$$

schreibe diese Bedingung als

$$\alpha^k \beta^2 \equiv \alpha^k = -\beta \alpha^k \beta \quad (\alpha^k \beta = -\beta \alpha^k)$$

und benutze die zyklische Invarianz der Spur (d.h. $Sp(AB) = Sp(BA)$ für quadratische Matrizen A, B),

$$Sp(\alpha^k) = -Sp(\beta\alpha^k\beta) = -Sp(\alpha^k\beta^2) = -Sp(\alpha^k) = 0, \quad \text{und analog für } \beta$$

$$\Rightarrow Sp(\alpha^k) = Sp(\beta) = 0.$$

$\Rightarrow$ Die Anzahl der positiven und negativen Eigenwerte muss gleich sein.

$\Rightarrow$ N ist geradzahlig.

Annahme: $N = 2 \Rightarrow$ nicht möglich, denn die 4 2×2 Matrizen $\mathbb{I}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ enthalten nur 3 antikommutierende Matrizen, wir brauchen jedoch **vier**.

$N = 4$ ist demnach die kleinstmögliche Dimension, in der die geforderte algebraische Struktur realisierbar ist.

Eine spezielle Darstellung der Matrizen ist

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und der Einheitsmatrix $\mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Die algebraischen Beziehungen (*) lassen sich leicht testen, z.B. ist die zweite Bedingung in (*):

$$\alpha^k\beta + \beta\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

Diese Darstellung ist die „Standarddarstellung“ der DE. ψ heist „Vierspinor“ oder einfach „Spinor“, ψ^+ der **hermitesch adjungierte** Spinor. Sie haben spezifische Transformationseigenschaften unter LT.

DE in kovarianter Form:

Um zeitliche und räumliche Ableitungen in kovarianter Schreibweise zusammenzufassen, multiplizieren wir zunächst die DE mit β/c und erhalten DE in kovarianter Form.

4.4 Dirac-Gleichung in kovarianter Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi - \underbrace{\left[\frac{\hbar c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta mc^2 \right]}_{H_D} \psi = 0 \quad | \cdot \left(-\frac{\beta}{c} \right)$$

$$\left[-i\hbar \beta \partial_0 - i\hbar \beta \alpha^k \partial_k + mc \right] \psi = 0 \quad (\text{mit } \partial_0 = \partial/(c\partial t))$$

definiere neue Dirac-Matrizen

$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^k \equiv \beta \alpha^k$$

mit den folgenden Eigenschaften

- (1) γ^0 hermitesch, $\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger$, $(\gamma^0)^2 = \mathbb{I}$
- (2) γ^k antihermitesch, $(\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k$; $(\gamma^k)^2 = -\mathbb{I}$

Beweis:

$$(\gamma^k)^\dagger = (\beta \alpha^k)^\dagger = \alpha^k \beta = -\beta \alpha^k = -\gamma^k$$

$$(\gamma^k)^2 = \beta \alpha^k \cdot \beta \alpha^k = -\beta \beta \alpha^k \alpha^k = -\mathbb{I}$$

Diese Relationen ergeben zusammen mit den folgenden Antikommutationsrelationen ($k = 1, 2, 3$)

$$\{\gamma^0, \gamma^k\} \equiv \gamma^0 \gamma^k + \gamma^k \gamma^0 = \beta \beta \alpha^k + \beta \underbrace{\alpha^k \beta}_{-\beta \alpha^k} = 0$$

$$\{\gamma^k, \gamma^l\} \equiv \gamma^k \gamma^l + \gamma^l \gamma^k = \underbrace{\beta \alpha^k \beta \alpha^l}_{-\alpha^k \beta} + \underbrace{\beta \alpha^l \beta \alpha^k}_{-\alpha^l \alpha^k} = 0, \quad k \neq l; = -2 \text{ für } k = l$$

$\Rightarrow$ die grundlegende algebraische Struktur der Dirac-Matrizen:

$$\boxed{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}}, \quad (\gamma^\mu)^2 = g^{\mu\mu} \text{ „Clifford-Algebra“}$$

und die Dirac-Gleichung erhält die Gestalt

$$(-i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu + mc) \psi = 0$$

$$\boxed{\left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0} \quad \text{Dirac-Gleichung, DE}$$

R.Feynman hat folgende abkürzende Schreibweise eingeführt:

$$\not{v} \equiv \gamma \cdot v \equiv \gamma^\mu v_\mu = \gamma_\mu v^\mu = \gamma^0 v^0 - \gamma \vec{v} \quad (\gamma_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\nu)$$

($v^\mu \hat{=}$ beliebiger Vektor; slash $/ \hat{=}$ skalare Multiplikation mit γ_μ)

Damit wird die freie Dirac-Gleichung

$$\left[-i \not{\partial} + \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0$$

mit den γ -Matrizen in der oberen angegebenen speziellen Darstellung („Dirac-Darstellung“)

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

Eine dazu äquivalente Darstellung ergibt sich durch $\gamma \rightarrow M\gamma M^{-1}$ mit einer beliebigen nichtsingulären Matrix M (d.h. $\det M \neq 0$). (Andere gebräuchliche Darstellung: „Majorana“- , „chirale“ Darstellungen, siehe Literatur).

4.5 Lösungen der freien DE

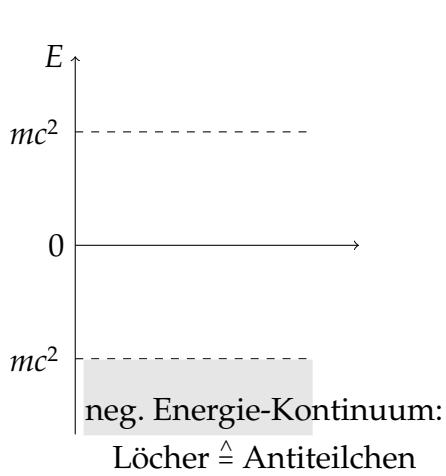
Die Lösungen zu definiertem Impuls $\vec{p}$ sind

$$\psi_{p\ 1,2}^{(+)}(x) = e^{-i(cp_0 t - \vec{p}\vec{x})/\hbar} \begin{pmatrix} \chi_{1,2}^{(+)} \\ \frac{\vec{p}\vec{\chi}_{1,2}^{(+)}}{p_0 + mc} \end{pmatrix} \quad \text{positive Energie}$$

$$\psi_{p\ 1,2}^{(-)}(x) = e^{i(cp_0 t - \vec{p}\vec{x})/\hbar} \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\vec{\chi}_{1,2}^{(-)}}{p_0 + mc} \\ \chi_{1,2}^{(-)} \end{pmatrix} \quad \text{negative Energie}$$

mit $p_0 = +\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} > 0$: $E^2 = c^2 p_0^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ (relativistische Energie-Impuls-Beziehung), wobei $\chi_{1,2}^{(\pm)}$ jeweils zwei linear unabhängige **zweikomponentige** konstante Spinoren bezeichnen.

Wie bei der KGE gibt es zwei Sorten von Lösungen, die einen mit positiver Energie $E = +cp_0$, für die sich die Interpretation als Teilchenwellenfunktion anbietet, und die anderen mit negativer Energie $E = -cp_0$; dazwischen liegt das „verbotene“ Energieintervall $[-m \cdot c^2 \dots m \cdot c^2]$.



(Zur physikalischen Interpretation der negativen Energien und dem Zusammenhang zu Antiteilchen siehe auch Einleitung).

⇒ Asymmetrie zwischen Lösungen zu positiver und negativer Energie die erst in der QFT aufgehoben wird.

Die DE ist dort eine Gleichung für Feldoperatoren; Teilchen und Antiteilchen werden symmetrisch.

Die positiven und negativen Lösungen sind aufgrund der Freiheiten bei der Wahl der Spinoren $\chi_{1,2}^{(\pm)}$ noch nicht eindeutig spezifiziert, so dass wir neben dem Dirac-Hamiltonoperator H_D und dem Impulsoperator $\vec{p}$ einen weiteren Operator erwarten, der nur auf die inneren Freiheitsgrade der Wellenfunktionen wirkt, und zusammen mit H_D und $\vec{p}$ einen vollständigen Satz kommutierender Observabler bildet. Dieser Operator hängt mit dem **Spin** zusammen, dessen Quantenzahl dem Wert $\frac{1}{2}$ hat (siehe später); die DE ist deshalb für die Beschreibung von Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen geeignet. Für ein freies ruhendes Teilchen mit Wellenzahl $k = 0$, Impuls $\vec{p} = 0$ ist die DE

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \beta mc^2 \psi$$

mit den Lösungen zu pos./neg. Energien $E = \pm mc^2$

$$\begin{aligned} \psi_1^+ &= e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \psi_2^+ &= e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi_1^- &= e^{+\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \psi_2^- &= e^{+\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

4.6 Kopplung an das elektromagnetische Feld

Wie in der nichtrelativistischen Theorie wird der kanonische Impuls $\vec{p}$ durch den kinetischen Impuls $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ ersetzt, und das skalare elektrische Potential $e\phi$ kommt zur

Ruheenergie im Dirac-Hamilton-Operator hinzu („minimale Kopplung“; siehe KGE)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[c\vec{\alpha} \underbrace{\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)}_{\vec{\pi}} + \beta mc^2 + e\phi \right] \psi$$

mit der Ladung e des Teilchens mit Masse m , beim Elektron also $e = -e_0$.

Der Hamiltonoperator **mit Feld** ist nach wie vor **hermitesch**. Analog zum Klein-Gordon Fall ist die Gleichung unter der lokalen **Eichtransformation**

$$\begin{aligned} \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \\ \vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi \end{aligned}$$

bzw. $A^\mu \rightarrow A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \chi$ **invariant**, wenn gleichzeitig die Wellenfunktion ψ mit einer entsprechenden Phase multipliziert wird:

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = e^{i\Lambda(x)} \psi \\ \Lambda(x) &= \frac{e}{\hbar c} \chi(x) \end{aligned}$$

($\chi(x)$ eine beliebige reelle skalare Funktion der Raumzeit-Koordinaten).

Nichtrelativistischer Grenzfall

Verwende die explizite Darstellung der Dirac-Matrizen

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

und zerlege den 4er Spinor ψ in zwei zweikomponentige Spaltenvektoren,

$$\psi = \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix}; \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \bar{\chi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \bar{\varphi} \end{pmatrix} \quad \text{wegen } \alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$$

$\Rightarrow$ DE :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} = c \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \bar{\chi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \bar{\varphi} \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ -\bar{\chi} \end{pmatrix} \quad (*)$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist die Ruheenergie mc^2 die größte Energie im Problem; wir zerlegen deshalb in der Lösung zu positiver Energie

$$\begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} = e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}.$$

Hier variieren $\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ nur langsam und genügen exakt der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \varphi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (**)$$

(Bew: die Zeitableitung auf der linken Seite der Gleichung $(*)$ ergibt einen Term

$$i\hbar \cdot \left(\frac{-mc^2}{\hbar} \right) e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix};$$

$$\text{Division durch } e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \text{ und Subtraktion von } i\hbar \cdot \left(\frac{-mc^2}{\hbar} \right) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

ergibt die rechte Seite von $(**)$

$$\text{beachte: } -mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} = -2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}.$$

In der „unteren“ Gleichung in $(**)$ vernachlässigen wir $\hbar\dot{\chi}$ und $e\phi\chi$ gegenüber $2mc^2\chi$.

Ansatz: $\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \varphi$

⇒ Im nichtrelativistischen Grenzfall ist χ gegenüber φ um einen Faktor der Größenordnung $\sim \frac{v}{c}$ kleiner; φ ist die „große“, χ die „kleine“ Komponente des Spinors; sie wird im nichtrelativistischen Grenzfall vernachlässigt.

Ansatz in „erste“ DGL in (*) für ϕ einsetzen; der Massenterm fällt weg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \vec{\pi}) (\vec{\pi} \vec{\sigma}) + e\phi \right] \varphi, \quad \vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} = -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

und es ist

$$\sigma^i \sigma^j = \delta_{ij} + i\epsilon^{ijk} \sigma^k$$

$$\text{prüfen durch Nachrechnen: } \epsilon^{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{gerade Permutation} \\ -1, & \text{ungerade Permutation von } 1, 2, 3 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\epsilon^{ijk} (a_j b^k - b^k a_j) \equiv (\vec{a} \times \vec{b})_i$$

$$\Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{a} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{b} = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{b})$$

$$\Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} = \vec{\pi}^2 + i\vec{\sigma} (\vec{\pi} \times \vec{\pi}) = \vec{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \vec{B} \quad \text{mit } \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\left[\vec{\pi} \times \vec{\pi} = (-i\hbar) \left(-\frac{e}{c} \right) (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = i\frac{e\hbar}{c} \vec{B} \right]$$

denn

$$(\vec{\pi} \times \vec{\pi})^i = -i\hbar \left(-\frac{e}{c} \right) \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j) = i\frac{e\hbar}{c} \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j)$$

$$\text{mit } \boxed{B^i = \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j)} \triangleq \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

⇒ **DE mit elektromagnetischem Feld in nichtrelativistischen Grenzfall („große“ Komponente)**

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \vec{B} + e\phi \right] \phi}$$

Dieses Resultat entspricht der **Pauli-Gleichung** der nichtrelativistischen QM für den „**Pauli-Spinor**“ φ , dessen beide Komponenten den Spin des Elektrons beschreiben. Auch der (bis auf QED-Korrekturen) richtige **gyromagnetische Faktor** $g = 2$ kommt heraus.

Zum **Beweis** wiederhole die aus der nichtrelativistischen QM bekannten Schritte:

Gegeben sei ein homogenes Magnetfeld $\vec{B}$ mit Vektorpotential $\vec{A}$:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}; \quad \vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$$

$$(\Rightarrow) \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{2} \vec{\nabla}(\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B}(\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{2} \vec{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{B}$$

$$\text{wegen } \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) \equiv \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c}(\vec{a} \cdot \vec{b}); \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{r} = \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y} = 2$$

Bahndrehimpuls und Spin:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \text{Bahndrehimpuls}$$

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$$

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 - \frac{2e}{c} \vec{p} \cdot \vec{A} \right) - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} =$$

$$\left[\text{Nebenrechnung: } -2\vec{p} \cdot \vec{A} = -2\frac{1}{2} \vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) = -\vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = -\vec{L} \cdot \vec{B}, \quad \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \frac{2\vec{S}}{\hbar} \cdot \vec{B} \right]$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 - \frac{e}{2mc} (\vec{L} \cdot \vec{B} + 2\vec{S} \cdot \vec{B})$$

$\Rightarrow$ Nichtrelativistische Näherung der Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \underbrace{\frac{2}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}}_{\equiv \vec{\mu}} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi \right] \varphi$$

mit $\vec{\mu}$ = magnetisches Moment aus Bahn- und Spinanteil.

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = [H_0 + H_{int}] \phi$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

$$H_{int} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S})$$

Das Spin-Moment ist demnach

$$\vec{\mu}_{Spin} = \frac{e}{2mc} \cdot 2\vec{S} \equiv g_e \cdot \frac{e}{2mc} \vec{S}$$

mit dem **Landé-Faktor** (gyromagnetischen Faktor)

$g_e = 2$: bestimmt um wieviel stärker sich der Spin auf die Teilchenenergie auswirkt als ein gleich großer Bahndrehimpuls (Im Rahmen der **Quantenelektrodynamik** werden Korrekturterme abgeleitet: $g_e^{th} = 2.0023193048(8)$, $g_e^{ex} = 2.0023193043622(22)$). Mit dem **Bohrschen Magneton** (Betrag)

$$\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e c} (\sim 5.788 \cdot 10^{-11} \text{MeV} \cdot \text{T}^{-1}); \quad \frac{e}{2mc} \equiv -\frac{\mu_B}{\hbar}$$

lässt sich das magnetische Spin-Moment des Elektrons ($m \equiv m_e; e \equiv -1$ elektr. Elementarladung (Vorzeichen!) $\equiv -e_0$) schreiben als

$$\vec{\mu}_{Spin} = -g_e \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

Für ein **Coulombpotential** $e\phi = -\frac{Ze_0^2}{r}$ ist das Zeitverhalten der Lösung φ durch die Rydberg-Energie charakterisiert, $R_y = \frac{mc^2 \alpha^2}{2} \rightarrow 13.6 \text{eV}$ für $Z = 1$ ($\alpha^2 = \frac{e^2}{\hbar c}$).

Bei kleinem Z (insbesondere H-Atom mit $Z = 1$) ist die Ruheenergie des Elektrons sehr viel größer als diese Energie, $911 \text{keV} \gg 13.6 \text{eV}$, so dass die Vernachlässigung von χ in der Bewegungsgleichung gerechtfertigt ist.

Ankopplung an das elektromagnetische Feld in kovarianter Form: (analog zu KGE)

$$\begin{aligned} \text{DE} \quad & \left[-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0 \\ & \left[-i \not{\partial} + \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0 \end{aligned}$$

Impulsoperator in kovarianter Notation

$$\begin{aligned} p_\mu &= i\hbar \partial_\mu, & \partial_\mu &= \frac{\partial}{\partial x^\mu} & \text{kovariant} \\ p^\mu &= i\hbar \partial^\mu, & \partial^\mu &= \frac{\partial}{\partial x_\mu} & \text{kontravariant} \end{aligned}$$

Zeitliche und räumliche Komponenten:

$$p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu, \quad A^\mu = (A^0, \vec{A}), \quad A^0 = c\phi$$

(d.h. die Ableitungen werden ersetzt durch „Ableitung-Viererpotential“)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{e}{c} A_\mu$$

$$\text{entspricht } i\hbar \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{c\partial t} - e\phi$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i} + \frac{e}{c} A_i = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i} - \frac{e}{c} A_i$$

$$\Rightarrow \left[-\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) + mc \right] \psi = 0 \quad \begin{array}{l} \text{Relativistische kovariante} \\ \text{Form der DE mit em. Feld} \end{array}$$

Kontinuitätsgleichung mit elektromagnetischem Feld

Aufgrund der Hermitezität des Hamilton-Operators ermöglicht die DE -im Gegensatz zur KGE- die Definition einer positiv definiten Wahrscheinlichkeitsdichte.

Beweis: DE

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + e\phi + \beta mc^2 \right] \psi(x)$$

$$\psi^+ = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$$

Multiplikation mit ψ^+

$$\Rightarrow i\hbar \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \psi^+ \vec{\alpha} \vec{\nabla} \psi - e\psi^+ \vec{\alpha} \vec{A} \psi + e\phi \psi^+ \psi + mc^2 \psi^+ \beta \psi$$

Adjunktion des DE (mit $\alpha = \alpha^+$, $\beta = \beta^+$) und anschließende Multiplikation von rechts mit ψ ergibt

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar c}{i} (\vec{\nabla} \psi^+) \alpha \psi - e\psi^+ \vec{\alpha} \vec{A} \psi + e\phi \psi^+ \psi + mc^2 \psi^+ \beta \psi$$

Subtraktion dieser beiden Gleichungen ergibt eine Kontinuitätsgleichung der Form (die Terme mit $\vec{A}, \phi, m$ heben sich weg):

$$\boxed{\frac{\partial \varrho(x)}{\partial t} + \vec{\nabla} \vec{j}(x) = 0}$$

$$\text{mit } \varrho = \psi^+ \psi, \quad \frac{\partial \varrho}{\partial t} = \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi, \quad \vec{j} = \psi^+ c \vec{\alpha} \psi$$

Wendet man hierauf den **Gaußschen Satz** an, ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \varrho = - \int d^3x \vec{\nabla} \vec{j} = \oint d\vec{F} \vec{j} = 0 :$$

die Gesamtwahrscheinlichkeit ist zeitlich konstant, $\int d^3x \varrho(x) = \text{const.}$

Dies rechtfertigt zusammen mit

$$\psi^+ \psi = \sum_{\mu} \psi_{\mu}^* \psi_{\mu} = \sum_{\mu} |\psi_{\mu}|^2 \geq 0$$

die Interpretation von ϱ als **positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte**, und dementsprechend $\vec{j}$ als Wahrscheinlichkeitsstromdichte.

Ferner kann das in der nichtrelativistischen QM eingeführte Skalarprodukt (in der Ortsdarstellung) übernommen werden:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d^3x \psi^+(x) \phi(x)$$

mit den Konsequenzen

- **Orthogonalität** der Eigenzustände hermitescher Operatoren mit verschiedenen Eigenwerten
- **Darstellungsunabhängigkeit** des Skalarproduktes unter unitären Transformationen:

Im Gegensatz zum nichthermiteschen Klein-Gordon-Fall ist im hermiteschen Dirac-Fall **keine** Modifikation der in der nichtrelativistischen Theorie gebräuchlichen Begriffe „Skalarprodukt“, „Hermitizität“ und „Unitarität“ erforderlich.

(In der Klein-Gordon Theorie lässt sich ein „verallgemeinertes Skalarprodukt“ definieren:

$$\langle \psi | \phi \rangle_V = \int d^3x \psi^+(x) \sigma_3 \phi(x).$$

5 Invarianzen der Dirac-Gleichung

5.1 Lorentz-Kovarianz

Die Lorentz-Kovarianz wurde bereits bei der Ableitung der DE gefordert, d.h. sie ist in der **Gestalt der DE** berücksichtigt, Wegen der prinzipiellen Bedeutung soll sie dennoch erneut diskutiert werden.

Inertialsysteme sind Bezugssysteme, in denen sich kräftefreie Teilchen gleichförmig (= mit konstanter Geschwindigkeit) bewegen. **Relativistische Invarianz** einer Gleichung bedeutet, dass diese Gleichung in allen Inertialsystemen die gleiche Form annimmt.

1. Die **Lorentz-Transformationen** (LT) geben an, wie sich die Koordinaten zweier Inertialsysteme ineinander transformieren. Hier soll jetzt die Transformation des Dirac-Spinors unter der Lorentz-Transformation gezeigt werden. Im Unterschied zur Galilei-Transformation vermischen die Lorentz-Transformationen Raum- und Zeitkoordinaten.

Die folgenden zwei **Beziehungen** definierten die **Lorentz-Transformationen**:

- Aus der Forderung der Invarianz des d'Alembert-Operators

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = g_{\mu\nu} \partial^\mu \partial^\nu = \partial_\mu g^{\mu\nu} \partial_\nu$$

ergibt sich

$$\boxed{\Lambda^\lambda{}_\mu g^{\mu\nu} \Lambda^\varrho{}_\nu = g^{\lambda\varrho}}, \quad (*)$$

oder in Matrixform

-

$$\boxed{\Lambda g \Lambda^T = g} \quad (**)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \partial_\mu &\equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\lambda}{\partial x^\mu} \cdot \frac{\partial}{\partial x'^\lambda} = \Lambda^\lambda{}_\mu \partial'_\lambda \\ \Rightarrow \partial_\mu g^{\mu\nu} \partial_\nu &= \Lambda^\lambda{}_\mu \partial'_\lambda g^{\mu\nu} \Lambda^\varrho{}_\nu \partial'_\varrho \stackrel{!}{=} \partial'_\lambda g^{\lambda\varrho} \partial'_\varrho \\ \Rightarrow \Lambda^\lambda{}_\mu g^{\mu\nu} \Lambda^\varrho{}_\nu &= g^{\lambda\varrho} \\ &\stackrel{\wedge}{=} \boxed{\Lambda g \Lambda^T = g} \quad \square \end{aligned}$$

Lorentz-Gruppe

Zunächst soll hier gezeigt werden, dass die Lorentz-Transformationen $(*)$, $(**)$ eine Gruppe bilden:

(a) Abgeschlossenheit

Betrachte zwei Lorentz-Transformationen Λ_i und Λ_j , $i \neq j$. Die Nacheinanderausführung dieser Transformationen ergibt:

$$(\Lambda_i \Lambda_j)^T g (\Lambda_i \Lambda_j) = \Lambda_j^T (\Lambda_i^T g \Lambda_i) \Lambda_j = \Lambda_j^T g \Lambda_j = g \quad \square$$

dabei beachte man $(**)$

(b) Einselement

Sei $\mathbb{I}$ Einheitsmatrix $\Rightarrow \mathbb{I}\Lambda = \Lambda\mathbb{I}$

(c) Inverses Element

$$g^{-1} \Lambda^T g \Lambda = g^{-1} g = \mathbb{I} \Rightarrow \Lambda^{-1} = g^{-1} \Lambda^T g$$

Damit bilden die Lorentz-Transformationen eine Gruppe, die als **Lorentz-Gruppe** bezeichnet wird.

Aus der Forderung der Invarianz des d'Alembert-Operators lässt sich die Determinante von Λ bestimmen, für die gilt: $(\det \Lambda)^2 = 1 \Rightarrow \det \Lambda = \pm 1$. Das bedeutet, dass die Lorentz-Transformation die Drehung und Spiegelung im Minkowski-Raum darstellt. Außerdem wird auch die Zeitkoordinate gespiegelt, denn es gilt:

Aus dem ME $\lambda = 0$, $\varrho = 0$ der Definitionsgleichung folgt

$$\Lambda^0_{\mu} g^{\mu\nu} \Lambda^0_{\nu} = 1 = (\Lambda^0_0)^2 - \sum_k (\Lambda^0_k)^2 = 1$$

$$\Rightarrow \Lambda^0_0 \geq 1 \text{ oder } \Lambda^0_0 \leq -1$$

Die Vorzeichen der Diskriminante von Λ und das von Λ^0_0 werden zur Klassifizierung der Elemente der Lorentz-Gruppe verwendet:

	$\text{sgn} \Lambda^0_0$	$\det \Lambda$
eigentlich orthochron $L_+^{\uparrow}$	1	+1
uneigentlich orthochron $L_-^{\uparrow}$	1	-1
Zeitspiegelungsartig $L_-^{\downarrow}$	-1	-1
Raum-Zeit-Spiegelungsartig $L_+^{\downarrow}$	-1	+1

Eigentliche LT: Ausschluss von Raumzeit-Translation, Raumreflexion, Zeitspiegelung.

Spezielle eigentliche LT: Ausschluss von 3d-Rotationen (Wie bei der Transformation Laborsystem $\leftrightarrow$ Schwerpunktsystem).

Im Folgenden wird die eigentliche orthochrone Lorentz-Gruppe betrachtet.

Bei **gleichförmiger** Bewegung hängen die Koordinaten eines Ereignisses zweier Inertialsysteme I und I' durch eine **lineare** Transformation miteinander zusammen:

$$I \longrightarrow I' : x^\mu \longrightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad \text{eigentliche LT} \quad (1)$$

Dazu ist eine Transformation

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) \quad (2)$$

gesucht, so dass die folgenden Forminvarianz in den beiden Inertialsystemen gilt:

$$I : \left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x) = 0 \quad (3)$$

$$I' : \left(-i\gamma^\mu \partial'_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0 \quad (4)$$

Dabei soll $S(\Lambda)$ eine invertierbare 4×4 -Matrix sein, die noch bestimmt werden muss. Aus der Invertierbarkeit von S folgt:

$$\psi(x) = S(\Lambda)^{-1} \psi'(x'). \quad (5)$$

Die γ -Matrizen sind Lorentz-invariant. Diese Eigenschaft kann durch die folgende Rechnung nachgewiesen werden:

Beweis: γ^μ sind bis auf eine lineare Transformation durch ihre Algebra eindeutig bestimmt. Es gilt für eine nichtsinguläre Matrix A : $\tilde{\gamma}^\mu = A\gamma^\mu A^{-1}$.

Wir nehmen an, dass γ^μ unter LT zu γ'^μ transformiert wird:

$$\gamma'^\mu = S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda).$$

Dann kann man eine neue Basisdarstellung so wählen, dass gilt:

$$\tilde{\gamma}' = \gamma'^\mu \Rightarrow A = S^{-1}(\Lambda) \quad \square$$

Aus der Beziehung (5) ist der Wechsel des Bezugssystems auf beiden Seiten möglich. Es gilt für den transformierten Gradienten:

$$\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} = (\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} \quad \text{kovarianter Vierergradient.} \quad (6)$$

Die letzte Gleichheit in (6) folgt aus der Umformung der Gleichung (1), denn es gilt $((\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} x'^{\mu} = x^{\nu})$. Setzt man jetzt diese Gleichung (6) in (4) ein, so ergibt sich:

$$\left(-i\gamma^{\mu} \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} + \frac{mc}{\hbar} \right) S(\Lambda) \psi(x) = 0 \quad (7)$$

Multiplikation von links mit $S(\Lambda)^{-1}$ ergibt

$$\left(-iS(\Lambda)^{-1} \gamma^{\mu} \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} S(\Lambda) \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x) = 0 \quad (8)$$

Damit diese Gleichung mit (3) übereinstimmt, muss gelten:

$$\begin{aligned} S(\Lambda)^{-1} \gamma^{\mu} \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} S(\Lambda) &= \gamma^{\nu} \\ \Leftrightarrow S(\Lambda)^{-1} \gamma^{\mu} S(\Lambda) (\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} &= \gamma^{\nu} \\ \Leftrightarrow \gamma^{\mu} (\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} &= S(\Lambda) \gamma^{\nu} S(\Lambda)^{-1} \end{aligned}$$

Daher bekommt man die Gleichheit:

$$S(\Lambda) \gamma^{\mu} S(\Lambda)^{-1} = (\Lambda^{-1})^{\mu}_{\nu} \gamma^{\nu}$$

Für die genaue Konstruktion der Matrix $S(\Lambda)$ siehe Literatur.

2. Poincaré-Transformationen ($\equiv$ die inhomogenen LT) haben die Gestalt

$$\begin{aligned} x'^{\mu} &= \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu} \\ x' &= \Lambda x + a \Leftrightarrow x' - a = \Lambda x \\ \Leftrightarrow x &= \Lambda^{-1}(x' - a) \\ \text{mit reellem } \Lambda^{\mu}_{\nu}, a^{\mu}. \end{aligned}$$

Poincaré-Gruppe $\equiv$ (inhomogene Lorentz-Transformation, $a^{\mu} \neq 0$). Gruppeneigenschaften können analog zu Lorentz-Gruppe nachgewiesen werden.

(Die Lorentz-Gruppe, bzw. die Gruppe der **homogenen LT** enthält alle Elemente mit $a^{\mu} = 0$).

Inhomogene LT werden durch (Λ, a) charakterisiert, z.B.

- Translationsgruppe $(\Lambda, a) = (\mathbb{I}, a)$
- Drehgruppe $(\Lambda, a) = (\mathbb{D}, 0)$

Bei einer Poincaré-Transformation zwischen zwei Inertialsystemen (I) und (I') mit

$$x' = \Lambda x + a \quad (9)$$

muss entsprechend dem Relativitätsprinzip die **Dirac-Wellenfunktion** ψ' aus ψ **rekonstruierbar** sein, d.h. zwischen ψ' und ψ muss ein lokaler Zusammenhang gelten

$$\psi'(x') = F(\psi(x)) = F(\psi(\Lambda^{-1}(x' - a))). \quad (10)$$

Die DE in (I) wird durch (1) und (2) in eine DE in I' transformiert $\Leftrightarrow$ Lorentz-Kovarianz der DE gilt (DE ist forminvariant gegenüber Poincaré-Transformation).

Der funktionale Zusammenhang muss linear sein (damit ψ und ψ' der linearen DE genügen):

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}(x' - a))$$

$$S(\Lambda) \quad 4 \times 4 \text{ Matrix}$$

In Komponenten:

$$\psi'_\alpha(x') = \sum_{\beta=1}^4 S_{\alpha\beta}(\Lambda)\psi_\beta(\Lambda^{-1}(x' - a)).$$

Die Bestimmung von $S(\Lambda)$ unter Poincaré-Transformation erfolgt analog zur Lorentz-Transformation. (siehe oben)

Eine Wellenfunktion, die sich bei LT gemäß $\psi' = S\psi$ transformiert, heißt vierkomponentiger Lorentz-Spinor. (Darstellungen von $S(\Lambda)$ siehe Literatur).

5.2 Paritätstransformation P

Übergang von einem räumlichen kartesischen Rechts- zu einem Linkssystem:

$$P: \quad t \rightarrow t' = t$$

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = -\vec{x}$$

(Raumspiegelung: rechts $\rightarrow$ links, oben $\rightarrow$ unten).

Ist die DE

$$\left[-i\gamma'^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0 \quad \text{invariant unter dieser Transformation?}$$

Ansatz für den Dirac-Spinor im gestrichenen System:

$$\psi'(\vec{x}', t') = S(P)\psi(\vec{x}, t)$$

können wir $S(P)$ so wählen, dass für ψ' die DE gilt? (jetzt $\hbar \equiv c \equiv 1$)

$$\begin{aligned} & \left[-i\gamma'^\mu \partial'_\mu + m \right] \psi'(\vec{x}', t') = 0 \\ & S^{-1}(P) \left[-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} - i\gamma^j \frac{\partial}{\partial x'^j} + m \right] \overbrace{S(P)\psi(\vec{x}, t)}^{=\psi'(\vec{x}', t')} = 0 \\ & \xRightarrow{\vec{x}' = -\vec{x}} S^{-1}(P) \left[-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma^j \frac{\partial}{\partial x^j} + m \right] S(P)\psi(\vec{x}, t) = 0 \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung reduziert sich auf die DE für $\psi(\vec{x}, t)$, falls

$$\begin{aligned} S^{-1}(P)\gamma^0 S(P) &= \gamma^0 & \gamma^0 &= \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \\ S^{-1}(P)\gamma^j S(P) &= -\gamma^j & \gamma^j &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ \sigma^j & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Das lässt sich erreichen durch die Wahl

$$\boxed{S(P) \equiv \gamma^0}, \quad \text{denn } (\gamma^0)^{-1}\gamma^0\gamma^0 = \gamma^0, \quad (\gamma^0)^{-1}\gamma^j\gamma^0 = -(\gamma^0)^{-1}\gamma^0\gamma^j = -\gamma^j$$

und der paritätstransformierte Dirac-Spinor ist

$$\boxed{\psi'(\vec{x}', t') = \gamma^0 \psi(\vec{x}, t) = \gamma^0 \psi(-\vec{x}', t')}$$

$\psi'(\vec{x}, t)$ erfüllt dieselbe Bewegungsgleichung und auch dieselben Antivertauschungsregeln wie $\psi(\vec{x}, t)$.

Mit dem **Dirac-adjungierten Spinor**

$$\boxed{\bar{\psi}(x) \equiv \psi^\dagger(x) \cdot \gamma^0} \quad (\psi^\dagger \equiv \text{hermitesch konjugierter Spinor})$$

sind dies - bei Ersetzung der **Spinoren** durch **Feldoperatoren** -

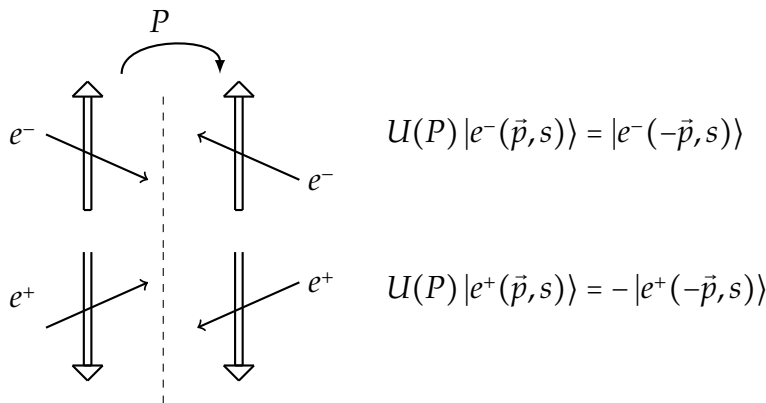
$$\begin{aligned} \{\psi(\vec{x}, t), \psi(\vec{y}, t)\} &= \{\bar{\psi}(\vec{x}, t), \bar{\psi}(\vec{y}, t)\} = 0 \\ \{\psi(\vec{x}, t), \bar{\psi}(\vec{y}, t)\} &= \gamma^0 \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \end{aligned}$$

und für ψ' genauso.

Die Spinoren $\psi(\vec{x}, t)$ und $\psi'(\vec{x}, t)$ sind **äquivalent**, d.h. sie gehen durch eine unitäre Transformation $U(P)$ im Zustandsraum auseinander hervor:

$$U(P)\psi(\vec{x}, t)U^{-1}(P) = \psi'(\vec{x}, t) = \gamma^0(\psi(\vec{x}, t))$$

Für **Ein-Teilchen-Zustände** ist mit $p' = \begin{pmatrix} p^0 \\ -\vec{p} \end{pmatrix}$:



Wenn die Bedingung für den unitären Operator U im Raum der Elektron-Positron Zustände ist

$$U(P)a_s^+(\vec{p})U^{-1}(P) = a_s^+(-\vec{p})$$

mit $a_s^+(\vec{p})$ Erzeugungsoperator für ein Elektron mit Spin s und Impuls $\vec{p}$

$$U(P)b_s^+(\vec{p})U^{-1}(P) = -b_s^+(-\vec{p})$$

mit $b_s^+(\vec{p})$ Erzeugungsoperator für ein Elektron mit Spin s und Impuls $\vec{p}$

d.h. nach der Dirac-Theorie haben Elektron und Positron negative Parität relativ zueinander. Das lässt sich experimentell verifizieren beim Zerfall von Positronium, dem wasserstoff-ähnlichen Bindungszustand von e^+ und e^- , in zwei Photonen - durch Messen der Winkelverteilungen (Der **Singlet-Zustand** - antiparallele Spins $S = 0$, $M_s = 0$ - heißt Para-Positronium $p - Ps$ bezeichnet als 1S_0 , hat eine mittlere Lebensdauer von $\tau \simeq 125$ ps und zerfällt in zwei Gammaquanten. Der **Triplet-Zustand** mit parallelen Spins $S = 1, M_s = -1, 0, 1$ heißt Orthopositronium mit einer mittleren Lebensdauer von $\tau \simeq 142$ ns, und zerfällt i.a. in drei Photonen. Annihilation in - meistens zwei - Photonen mit einer Gesamtenergie von 1022 keV erfolgt aus dem metastabilen $2s$ -Zustand in $1.1\mu s$, der Zerfall in dem Grundzustand ist schneller).

⇒ Zu jedem Zustand freier Elektronen und Positronen gibt es daher einen **paritäts-transformierten**, in dem alle **Impulse** umgekehrt sind, die **Spins** ungeändert, und für jedes **Positron** ein Faktor (-1) hinzugefügt ist.

Sowohl ψ als auch ψ' erfüllen die DE. Durch Beobachtungen an einem System freier Elektronen und Positronen können wir daher im Rahmen der Dirac-Theorie ein räumliches kartesisches Rechts- von einem Linkssystem nicht unterscheiden.

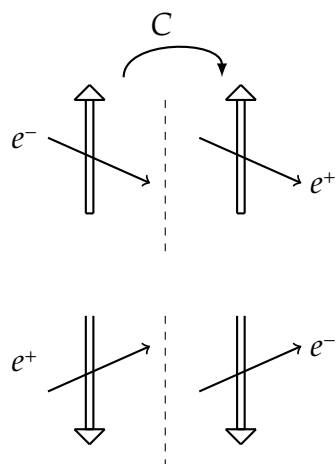
Diese Äquivalenz wird in der Natur erst durch die paritätsverletzende **schwache Wechselwirkung** aufgehoben. (Entdeckung der Paritätsverletzung: C.S. Wu et al. 1956/7)

5.3 Ladungskonjugations-Transformation C

Findet ein Beobachter, der die Rolle von Elektronen und Positronen vertauscht, andere Naturgesetz für die freien Teilchen?

(⇒ **Nein**: Im Rahmen der Dirac-Theorie ist es reine Konvention,, was Elektron/Positron genannt wird).

Wir suchen zunächst nach einer Invarianz der DE, die ψ und $\bar{\psi}$ vertauscht ($\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ Dirac-adjungierter Spinor)



Elektronen werden gegen Positronen vertauscht, Spin- und Impulsvariable unverändert gelassen.

ψ : vernichtet Elektron, erzeugt Positron

$\bar{\psi}$: vernichtet e^+ , erzeugt e^-

Aus der DE für ψ

$$[-i\gamma^\mu \partial_\mu + m] \psi(x) = 0$$

folgt die DE für den Dirac-adjungierten Spinor $\bar{\psi}$

$$[-i(-\gamma^\mu)^T \partial_\mu + m] \bar{\psi}^T(x) = 0; \quad (-\gamma^\mu)^T \text{ erfüllt die Antivertauschungsregeln.}$$

(Mit den Matrixrelationen (Prüfen durch Einsetzen))

$$\begin{aligned}\bar{\psi} &= \psi^\dagger \gamma^0, & \bar{M} &= \gamma^0 M^\dagger \gamma^0 \\ \gamma^0 &= \gamma^{0\dagger}, & \gamma^0 \gamma^0 &= 1, & \gamma^0 &= \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \\ \gamma^j &= (-\gamma^{j\dagger})^\dagger, & \gamma^j &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix} \\ \overline{M_1 M_2} &= \bar{M}_2 \cdot \bar{M}_1 \\ (\bar{\psi}_1 M \psi_2)^* &= \bar{\psi}_2 \bar{M} \psi_1, & \bar{\mathbb{I}} &= \mathbb{I}; & \bar{\gamma}^\mu &= \gamma^\mu \end{aligned}$$

Wie bei der Paritätstransformation erwarten wir bei Ladungskonjugation eine **Äquivalenztransformation** der Gestalt

$$S^{-1}(C) \gamma^\mu S(C) = (-\gamma^\mu)^T, \text{ jetzt jedoch für die transformierten } \gamma^{\mu'} \text{'s}$$

Das ist der Fall für

$$S(C) = i\gamma^2 \gamma^0$$

aus der DE für $\bar{\psi}^T$ folgt dann

$$S^{-1}(C) [-i\gamma^\mu \partial_\mu + m] S(C) \bar{\psi}^T(x) = 0$$

und der ladungskonjugierte Spinor

$$\psi^C(x) = S(C) \bar{\psi}^T(x)$$

erfüllt die DE,

$$[-i\gamma^\mu \partial_\mu + m] \psi^C(x) = 0,$$

und dieselben Antivertauschungsregeln wie $\psi(x)$ (Nachprüfen durch Einsetzen).

Bei der Ladungskonjugations-Transformation werden Elektronen mit Positronen vertauscht, Impuls- und Spinorvariable unverändert gelassen.

Die C-Invarianz ist in der Natur - wie die P-Invarianz - durch die schwache Wechselwirkung gebrochen.

Auch die CP-Invarianz ist gebrochen: J.W. Cronin, V. Fitch, Christenson, Turley 1964 (Nobelpreis: Cronin/Fitch, 1980)

J.H. Christenson, J.W. Cronin, V.L.Fitch, R.Turley (Princeton University): Physical Review Letters 13,138 (1964): „Evidence for the 2π Decay of the K_2^0 Meson“:

EVIDENCE FOR THE 2π DECAY OF THE K_2^0 MESON*†

J. H. Christenson, J. W. Cronin,‡ V. L. Fitch,‡ and R. Turlay§

Princeton University, Princeton, New Jersey

(Received 10 July 1964)

This Letter reports the results of experimental studies designed to search for the 2π decay of the K_2^0 meson. Several previous experiments have served^{1,2} to set an upper limit of 1/300 for the fraction of K_2^0 's which decay into two charged pions. The present experiment, using spark chamber techniques, proposed to extend this limit.

In this measurement, K_2^0 mesons were produced at the Brookhaven AGS in an internal Be target bombarded by 30-BeV protons. A neutral beam was defined at 30 degrees relative to the circulating protons by a $1\frac{1}{2}$ -in. $\times$ $1\frac{1}{2}$ -in. $\times$ 48-in. collimator at an average distance of 14.5 ft. from the internal target. This collimator was followed by a sweeping magnet of 512 kG-in. at ~20 ft. and a 6-in. $\times$ 6-in. $\times$ 48-in. collimator at 55 ft. A $1\frac{1}{2}$ -in. thickness of Pb was placed in front of the first collimator to attenuate the gamma rays in the beam.

The experimental layout is shown in relation to the beam in Fig. 1. The detector for the decay products consisted of two spectrometers each composed of two spark chambers for track delineation separated by a magnetic field of 178 kG-in. The axis of each spectrometer was in the horizontal plane and each subtended an average solid angle of 0.7×10^{-2} steradians. The spark chambers were triggered on a coincidence between water Cherenkov and scintillation counters positioned immediately behind the spectrometers. When coherent K_1^0 regeneration in solid materials was being studied, an anticoincidence counter was placed immediately behind the regenerator. To minimize interactions K_2^0 decays were observed from a volume of He gas at nearly STP.

The analysis program computed the vector momentum of each charged particle observed in the decay and the invariant mass, m^* , assuming each charged particle had the mass of the charged pion. In this detector the K_{e3} decay leads to a distribution in m^* ranging from 280 MeV to ~536 MeV; the $K_{\mu 3}$, from 280 to ~516; and the $K_{\pi 3}$, from 280 to 363 MeV. We emphasize that m^* equal to the K^0 mass is not a preferred result when the three-body decays are analyzed in this way. In addition, the vector sum of the two momenta and the angle, θ , between it and the direction of the K_2^0 beam were determined. This angle should be zero for two-body decay and is, in general, different from zero for three-body decays.

An important calibration of the apparatus and data reduction system was afforded by observing the decays of K_1^0 mesons produced by coherent regeneration in 43 gm/cm² of tungsten. Since the K_1^0 mesons produced by coherent regeneration have the same momentum and direction as the K_2^0 beam, the K_1^0 decay simulates the direct decay of the K_2^0 into two pions. The regenerator was successively placed at intervals of 11 in. along the region of the beam sensed by the detector to approximate the spatial distribution of the K_2^0 's. The K_1^0 vector momenta peaked about the forward direction with a standard deviation of 3.4 ± 0.3 milliradians. The mass distribution of these events was fitted to a Gaussian with an average mass 498.1 ± 0.4 MeV and standard deviation of 3.6 ± 0.2 MeV. The mean momentum of the K_1^0 decays was found to be 1100 MeV/c. At this momentum the beam region sensed by the detector was 300 K_1^0 decay lengths from the target.

For the K_2^0 decays in He gas, the experimental distribution in m^* is shown in Fig. 2(a). It is compared in the figure with the results of a Monte Carlo calculation which takes into account the nature of the interaction and the form factors involved in the decay, coupled with the detection efficiency of the apparatus. The computed curve shown in Fig. 2(a) is for a vector interaction, form-factor ratio $f^-/f^+ = 0.5$, and relative abundance 0.47, 0.37, and 0.16 for the K_{e3} , $K_{\mu 3}$, and $K_{\pi 3}$, respectively.³ The scalar interaction has been computed as well as the vector interaction

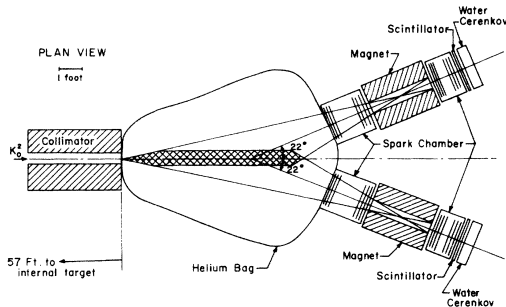


FIG. 1. Plan view of the detector arrangement.

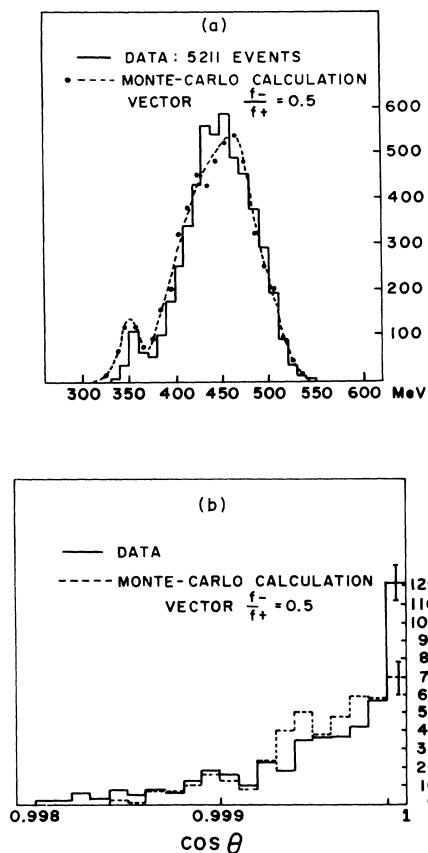


FIG. 2. (a) Experimental distribution in m^* compared with Monte Carlo calculation. The calculated distribution is normalized to the total number of observed events. (b) Angular distribution of those events in the range $490 < m^* < 510$ MeV. The calculated curve is normalized to the number of events in the complete sample.

with a form-factor ratio $f_-/f_+ = -6.6$. The data are not sensitive to the choice of form factors but do discriminate against the scalar interaction.

Figure 2(b) shows the distribution in $\cos \theta$ for those events which fall in the mass range from 490 to 510 MeV together with the corresponding result from the Monte Carlo calculation. Those events within a restricted angular range ($\cos \theta > 0.9995$) were remeasured on a somewhat more precise measuring machine and recomputed using an independent computer program. The results of these two analyses are the same within the respective resolutions. Figure 3 shows the re-

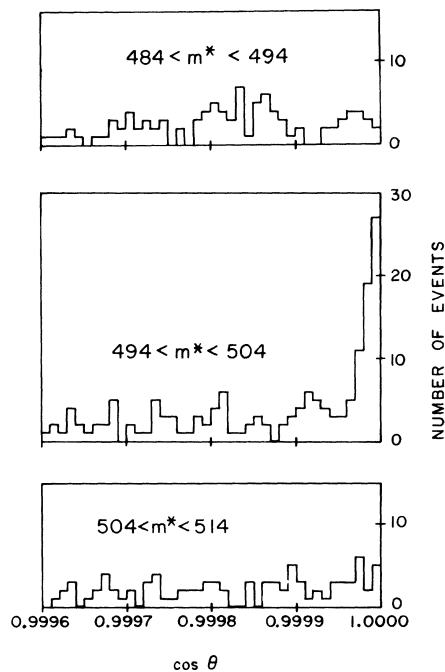


FIG. 3. Angular distribution in three mass ranges for events with $\cos \theta > 0.9995$.

sults from the more accurate measuring machine. The angular distribution from three mass ranges are shown; one above, one below, and one encompassing the mass of the neutral K meson.

The average of the distribution of masses of those events in Fig. 3 with $\cos \theta > 0.9999$ is found to be 499.1 ± 0.8 MeV. A corresponding calculation has been made for the tungsten data resulting in a mean mass of 498.1 ± 0.4 . The difference is 1.0 ± 0.9 MeV. Alternately we may take the mass of the K^0 to be known and compute the mass of the secondaries for two-body decay. Again restricting our attention to those events with $\cos \theta > 0.9999$ and assuming one of the secondaries to be a pion, the mass of the other particle is determined to be 137.4 ± 1.8 . Fitted to a Gaussian shape the forward peak in Fig. 3 has a standard deviation of 4.0 ± 0.7 milliradians to be compared with 3.4 ± 0.3 milliradians for the tungsten. The events from the He gas appear identical with those from the coherent regeneration in tungsten in both mass and angular spread.

The relative efficiency for detection of the three-body K_2^0 decays compared to that for decay to two pions is 0.23. We obtain 45 ± 9 events in

the forward peak after subtraction of background out of a total corrected sample of 22 700 K_2^0 decays.

Data taken with a hydrogen target in the beam also show evidence of a forward peak in the $\cos\theta$ distribution. After subtraction of background, 45 ± 10 events are observed in the forward peak at the K^0 mass. We estimate that ~ 10 events can be expected from coherent regeneration. The number of events remaining (35) is entirely consistent with the decay data when the relative target volumes and integrated beam intensities are taken into account. This number is substantially smaller (by more than a factor of 15) than one would expect on the basis of the data of Adair et al.⁴

We have examined many possibilities which might lead to a pronounced forward peak in the angular distribution at the K^0 mass. These include the following:

(i) K_1^0 coherent regeneration. In the He gas it is computed to be too small by a factor of $\sim 10^6$ to account for the effect observed, assuming reasonable scattering amplitudes. Anomalously large scattering amplitudes would presumably lead to exaggerated effects in liquid H_2 which are not observed. The walls of the He bag are outside the sensitive volume of the detector. The spatial distribution of the forward events is the same as that for the regular K_2^0 decays which eliminates the possibility of regeneration having occurred in the collimator.

(ii) $K_{\mu 3}$ or $K_{e 3}$ decay. A spectrum can be constructed to reproduce the observed data. It requires the preferential emission of the neutrino within a narrow band of energy, ± 4 MeV, centered at 17 ± 2 MeV ($K_{\mu 3}$) or 39 ± 2 MeV ($K_{e 3}$). This must be coupled with an appropriate angular correlation to produce the forward peak. There appears to be no reasonable mechanism which can produce such a spectrum.

(iii) Decay into $\pi^+\pi^-\gamma$. To produce the highly

singular behavior shown in Fig. 3 it would be necessary for the γ ray to have an average energy of less than 1 MeV with the available energy extending to 209 MeV. We know of no physical process which would accomplish this.

We would conclude therefore that K_2^0 decays to two pions with a branching ratio $R = (K_2^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-) / (K_2^0 \rightarrow \text{all charged modes}) = (2.0 \pm 0.4) \times 10^{-3}$ where the error is the standard deviation. As emphasized above, any alternate explanation of the effect requires highly nonphysical behavior of the three-body decays of the K_2^0 . The presence of a two-pion decay mode implies that the K_2^0 meson is not a pure eigenstate of CP . Expressed as $K_2^0 = 2^{-1/2}[(K_0 - \bar{K}_0) + \epsilon(K_0 + \bar{K}_0)]$ then $|\epsilon|^2 \cong R_T \tau_1 \tau_2$ where τ_1 and τ_2 are the K_1^0 and K_2^0 mean lives and R_T is the branching ratio including decay to two π^0 . Using $R_T = \frac{3}{2}R$ and the branching ratio quoted above, $|\epsilon| \cong 2.3 \times 10^{-3}$.

We are grateful for the full cooperation of the staff of the Brookhaven National Laboratory. We wish to thank Alan Clark for one of the computer analysis programs. R. Turlay wishes to thank the Elementary Particles Laboratory at Princeton University for its hospitality.

*Work supported by the U. S. Office of Naval Research.

[†]This work made use of computer facilities supported in part by National Science Foundation grant.

[‡]A. P. Sloan Foundation Fellow.

[§]On leave from Laboratoire de Physique Corpusculaire à Haute Energie, Centre d'Etudes Nucléaires, Saclay, France.

¹M. Bardon, K. Lande, L. M. Lederman, and W. Chinowsky, Ann. Phys. (N.Y.) **5**, 156 (1958).

²D. Neagu, E. O. Okonov, N. I. Petrov, A. M. Rosanova, and V. A. Rusakov, Phys. Rev. Letters **6**, 552 (1961).

³D. Luers, I. S. Mittra, W. J. Willis, and S. S. Yamamoto, Phys. Rev. **133**, B1276 (1964).

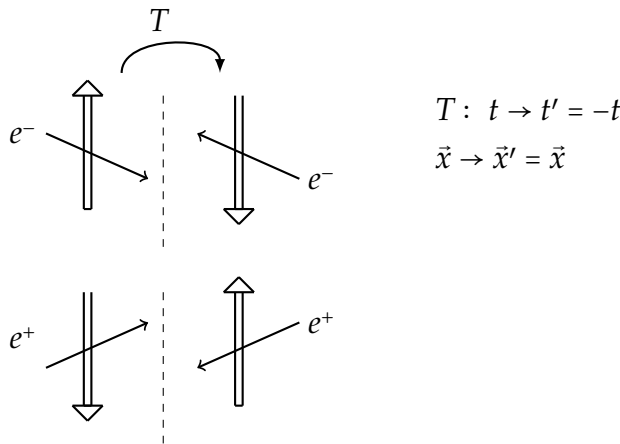
⁴R. Adair, W. Chinowsky, R. Crittenden, L. Leipuner, B. Musgrave, and F. Shively, Phys. Rev. **132**, 2285 (1963).

5.4 Zeitumkehr-Transformation T

Lässt sich durch Beobachtung freier Dirac-Teilchen die **positive** von der **negativen** Zeitrichtung unterscheiden?

⇒ Nein: freie Dirac-Teilchen zeichnen keine Zeitrichtung aus; lassen wir einen Dirac-Film freier Elektronen rückwärts laufen, sehen wir einen physikalisch möglichen Zustand.

Die Zeitumkehr-Transformation eines Elektron-Positron-Zustandes dreht Impulse und Spins um:



Der Dirac-Spinor mit umgekehrtem Zeitargument $\psi(+\vec{x}, -t)$ erfüllt die Differentialgleichung ($\hbar \equiv c \equiv 1$):

$$\left[-i(-\gamma^0) \frac{\partial}{\partial t} - i\gamma^j \frac{\partial}{\partial x^j} + m \right] \psi(\vec{x}, -t) = 0$$

mit $(t \rightarrow -t) \Rightarrow$ Dirac-Gleichung für $\gamma^0 \rightarrow -\gamma^0, \gamma^i \rightarrow \gamma^i$

Mit der Matrix $\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$, die bei eigentlichen LT invariant ist und mit allen γ^μ antivertauscht,

$$\gamma^\mu \gamma_5 + \gamma_5 \gamma^\mu = 0 \quad \forall \mu = 0, 1, 2, 3.$$

In der Standarddarstellung der γ^μ hat γ_5 die Gestalt $\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & 0 \end{pmatrix}$.

Damit findet man eine Transformation, die γ^0 in $-\gamma^0$ überführt und γ^j ungeändert lässt,

$$\boxed{S' = \gamma_5 \gamma^0} : \quad S' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad S'^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S'^{-1} \gamma^0 S' = -\gamma^0 : \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\gamma^0$$

$$S'^{-1} \gamma^j S' = \gamma^j$$

$\Rightarrow$ der Spinor

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = S' \psi(\vec{x}, -t) = \gamma_5 \gamma^0 \psi(\vec{x}, -t)$$

erfüllt die DE (Prüfen durch Einsetzen). Da die DE auch bei Ladungskonjugation invariant ist, erfüllt auch der Spinor

$$\psi'(\vec{x}, t) = S' \psi^C(\vec{x}, -t) = S(T) \bar{\psi}^T(\vec{x}, -t) \quad \text{die DE, mit}$$

$$S(T) = S' \cdot S(C) = \gamma_5 \gamma^0 \cdot i \gamma^2 \gamma^0 = -i \gamma_5 \gamma^2 = i \gamma^2 \gamma_5 = i \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & -\sigma^2 \end{pmatrix}$$

ψ' wird als **zeitumgekehrter Spinor** bezeichnet; er erfüllt die Antivertauschungsrelationen.

Es gibt **keine** unitäre Transformation im Fock-Raum, die ψ in ψ' überführt: dies leistet jedoch eine **antiunitäre** Transformation:

Ein Operator V ist antilinear, wenn $\forall$ Zustände $|a\rangle, |b\rangle$ und für alle komplexen Zahlen $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ gilt

$$V(c_1 |a\rangle + c_2 |b\rangle) = c_1^* V|a\rangle + c_2^* V|b\rangle.$$

Der hermitesch konjugierte Operator V^+ eines antilinearen Operators V ist definiert als

$$\langle a|V^+|b\rangle = \langle b|V|a\rangle : \quad V^+ \text{ ist ebenfalls antilinear.}$$

Ein Operator ist **antiunitär**, falls er antilinear ist und

$$V^+ V = V V^+ = \mathbb{I} \quad \text{erfüllt.}$$

Dann ist für alle $|a\rangle, |b\rangle$ und

$$|a'\rangle = V|a\rangle$$

$$|b'\rangle = V|b\rangle$$

die Relation erfüllt

$$\langle a'|b' \rangle = \langle b|a \rangle = \langle a|b \rangle^*$$

$\Rightarrow$ im Vergleich zu einer unitären Transformation ist also zusätzlich komplex zu konjugieren (bzw. der „bra“ mit dem „ket“ zu vertauschen: **Anfangs- und Endzustände werden vertauscht**).

Sei nun V antiunitär, und A ein beliebiger linearer Operator. Der zu A **antiunitär** transformierte Operator A' ist **definiert als**

$$A' \equiv (VAV^{-1})^+$$

d.h. gegenüber der unitären Transformation wird zusätzlich hermitesch konjugiert; der Zusammenhang zwischen A und A' wird linear:

für eine beliebige komplexe Zahl $c \in \mathbb{C}$ gilt

$$(c \cdot A)' = cA', \quad \text{und für die Matrixelemente gilt}$$

$$\langle a|A|b \rangle = \langle b'|A'|a' \rangle \quad \text{mit den gestrichenen Zuständen wie vorher.}$$

Nun gibt es eine antiunitäre Transformation $V(T)$, so dass gilt

$$[V(T)\psi(\vec{x}, t)V^{-1}(T)]^+ = \psi^+(\vec{x}, t) = S(T)\bar{\psi}^T(\vec{x}, -t).$$

Sie dreht **Impulse** und **Spin** um, und ist die physikalische Äquivalenztransformation der Zeitumkehr: Jedem Zustand $|a\rangle$ des ersten Beobachters kann der zweite Beobachter, der die Zeit umgekehrt zählt, den Zustand $|a'\rangle = V(T)|a\rangle$ zuordnen.

Jeder beobachtbaren Größe A kann der zweite Beobachter die Größe A' zuordnen,

$$A' = (VAV^{-1})^+,$$

die aus ψ' genau wie A aus ψ aufgebaut ist. Für die Erwartungswerte gilt

$$\langle a|A|a \rangle = \langle a'|A'|a' \rangle$$

d.h. die **Messresultate** sind in entsprechenden Zuständen **identisch** $\Rightarrow$

Für ein freies Dirac-Teilchen gilt daher **Zeitumkehr-Invarianz**. In der **schwachen WW** gibt es jedoch T -verletzende Effekte; im $K^0 - \bar{K}^0$ System ist deren experimenteller Nachweis 1998 gelungen.

Stets ist jedoch das Produkt $\Theta = CPT$ in relativistischen Feldtheorien mit **beliebiger Wechselwirkung** eine Invarianztransformation.

(G. Lüders, Ann. Phys. 2,1(1957); W. Pauli: „Niels Bohr and the development of physics“, McGraw-Hill & Pergamon Press, London (1955).)

Exkurs:

Nachweis der T-Invarianzverletzung im $K^0 - \bar{K}^0$ System.

CPLEAR-Kollaboration, Phys. Lett. B444, 43 (1998)

„LEAR“: Low Energy Antiproton Ring:

$$\left. \begin{array}{l} p + \bar{p} \rightarrow K^+ + \pi^- + \bar{K}^0 \\ \rightarrow K^- + \pi^+ + K^0 \end{array} \right\} \quad K^0, \bar{K}^0 \text{ entstehen mit gleicher Wahrscheinlichkeit}$$

Die Strangeness des erzeugten neutralen Kaons ($\bar{K}^0 : S = +1; K^0 : S = -1$) wird anhand der Ladung des erzeugten Kaons ermittelt.

$\bar{K}^0$ und K^0 wandeln sich durch Oszillationen ineinander um (bereits 1961 entdeckt) und bilden eine Mischung aus Kaon- und Antikaon-Zuständen ($\Delta S = 2$).

Die Verwandlung von $\bar{K}^0$ in K^0 und umgekehrt sind **zeitgespiegelte Prozesse**; wenn Zeitumkehrinvarianz gilt, werden gleich viele Antikaonen in Kaonen umgewandelt wie umgekehrt.

Exp. Ergebnis von CPLEAR: Die Umwandlung eines Antikaons in ein Kaon ist um 0.66% wahrscheinlicher als umgekehrt² $\Rightarrow$ **T-Invarianz ist verletzt** ($1.3 \cdot 10^6$ Ereignisse ausgewertet).

(**Achtung:** Ein Teil des beobachteten Effekts ist evtl. nicht auf T-Invarianzverletzung zurückzuführen, sondern auf die ebenfalls stattfindenden irreversiblen CP-verletzenden Zerfallsprozesse. Der genaue Anteil ist bisher offen).

²Die Strangeness des Endzustandes wird aus semileptonischen Zerfällen bestimmt, $K^0 \rightarrow e^+ \pi^- \nu$, $\bar{K}^0 \rightarrow e^- \pi^+ \bar{\nu}$ ($\Delta S = \Delta Q$)

Viewpoint

Particle Decays Point to an Arrow of Time

Michael Zeller

Department of Physics, Yale University, New Haven, CT 06520, USA

Published November 19, 2012

An experiment studying B meson decays makes a direct observation of time-reversal violation without relying on assumed relationships with other fundamental symmetries.

Subject Areas: **Particles and Fields****A Viewpoint on:****Observation of Time-Reversal Violation in the B0 Meson System**

J. P. Lees et al. (The BABAR Collaboration)

Phys. Rev. Lett. **109**, 211801 (2012) – Published November 19, 2012

Time moves irrevocably in one direction. Things get old, decay, and fall apart, but they rarely ever reassemble and grow young. But at the particle level, time's arrow is not so clearly defined. Most collisions and other particle interactions look the same whether run forwards or backwards. Physicists have, however, identified a few reactions that appear to change when time is reversed, but the reasoning has assumed certain relations between fundamental symmetries of particle physics. The BaBar collaboration has now observed time-reversal violation directly and unambiguously in decays of B mesons. The measured asymmetry, reported in *Physical Review Letters*[1], is statistically significant and consistent with indirect observations.

In trying to understand the nature of particle interactions, observing the behavior of those interactions under different symmetry transformations has proven invaluable in formulating and verifying the fundamental theory. It is well known, and has been experimentally shown, that the strong and electromagnetic interactions are unchanged when viewed in a mirror world, in which particle positions are reflected ($\vec{r}$ to $-\vec{r}$). In contrast, experiments in 1956 [2] demonstrated that the weak interaction is not invariant under such parity inversion (P). A decade later, researchers found evidence in K meson decays [3] that weak interactions may also violate a combination of parity inversion with charge conjugation (C), where particles are interchanged for antiparticles. Physicists continue to study CP violation, in part to explore whether it can explain the dominance of matter over antimatter in the universe. But a related symmetry, time inversion (T), has been more elusive. It involves running an experiment backwards (t to $-t$) and converting initial states to final states. Weak interactions may violate time-reversal symmetry, but observing this directly with high enough precision proves difficult.

It is, however, possible to infer time-reversal violation (TRV) through observations of CP violation in K and B

meson decays using the CPT theorem. The CPT theorem states that all local Lorentz invariant quantum field theories are invariant under the simultaneous operation of charge conjugation, parity reversal, and time reversal. Thus an experiment that measures a violation of CP might infer a corresponding lack of invariance under time reversal in order to maintain CPT invariance. Attempts to measure TRV without reference to CP violation have been controversial. Experiments at CPLEAR (measuring the difference in rates between K^0 transitions to $\bar{K}^0$ and $\bar{K}^0$ transitions to K^0 [4]) and at Fermilab (observing an asymmetry seen in the decay $K_L^0 \rightarrow \pi^+\pi^-e^+e^-$ [5]) claim to detect TRV directly, but some researchers have doubted this interpretation because of complicating factors in the K meson decays.

Using a method suggested previously [6], Lees *et al.* of the BaBar collaboration have now observed an explicit time-reversal violation in the decay of B mesons [1]. The experiment, performed at the Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) in California, takes advantage of entangled B^0 and $\bar{B}^0$ mesons in the $Y(4s)$ resonance produced in positron-electron (e^+e^-) collisions at SLAC. This allows measurement of an asymmetry that can only come about through a T inversion, and not by a CP transformation.

Each of the entangled B^0 and $\bar{B}^0$ mesons resulting from the $Y(4s)$ can decay into either a CP eigenstate (e.g., $J/\psi K_L$, called B_+ for CP even, and $J/\psi K_s$, called B_- for CP odd), or a state that identifies the flavor of the meson (e.g., l^-X for $\bar{B}^0$ and l^+X for B^0 , where $l^\pm$ is a lepton and X represents the other particles in the decay). To study T inversion, the experimenters selected events where one meson decayed into a flavor state and the other decayed into a CP eigenstate. The time between these two decays was measured, and the rate of decay of the second with respect to the first was determined. As an example, let's consider events in which

DOI: 10.1103/Physics.5.129

URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/Physics.5.129>

© 2012 American Physical Society

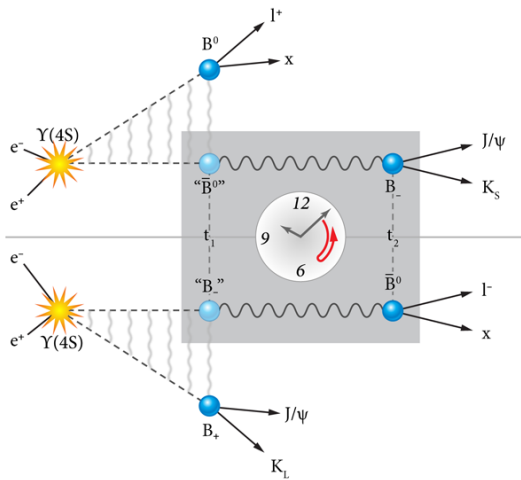


FIG. 1: Electron-positron collisions at SLAC produce a $Y(4s)$ resonance that results in an entangled pair of B mesons. When one meson decays at time t_1 , the identity of the other is “tagged” but not measured specifically. In the top panel, the tagged meson is a “ $\bar{B}^0$ ”. This surviving meson decays later at t_2 , encapsulating a time-ordered event, which in this case corresponds to “ $\bar{B}^0 \rightarrow B_-$ ”. To study time reversal, the BaBar collaboration compared the rates of decay in one set of events to the rates in the time-reversed pair. In the present case, these would be the “ $B_- \rightarrow \bar{B}^0$ ” events, shown in the bottom panel. (APS/Alan Stonebraker)

the first meson decays at time t_1 into $l^+ X$ for B^0 . Due to entanglement, the surviving meson is tagged as “ $\bar{B}^0$ ” without being measured. At a later time t_2 , this second meson decays into $J/\psi K_s$, implying a B_- (see Fig. 1). The researchers compared these “ $\bar{B}^0 \rightarrow B_-$ ” events to the time-reversed pair: “ $B_- \rightarrow \bar{B}^0$ ”, which are those events identified by both reversing the order of decays and exchanging initial and final states. In this example, the time-reversed events are the ones with a $J/\psi K_L$ decay followed by a $l^- X$ decay.

One of the keys to identifying the various B meson combinations is the energetic, asymmetric e^+e^- collider of the PEP-II at SLAC. In the asymmetric collider, the beams are tuned to a center-of-mass energy of 10.58 GeV, corresponding to the $Y(4s)$ mass. At that setting, 9 GeV electrons collide with positrons at 3.1 GeV, giving a boost to the resulting $Y(4s)$ and thus to its B and $\bar{B}$ decay products. This extra momentum makes it possible for the BaBar detector to determine the species of each final

state meson. The detector—built inside the flux return of a superconducting solenoid magnet—surrounds the e^+e^- collision point with cylindrical trackers followed by cylindrical calorimeters [7]. Those detectors both track the outgoing trajectories and identify the particle species of the collision products, with reconstruction of that information yielding the identities of the B mesons. The flavor identity of neutral B mesons was made on the basis of the charges of prompt leptons, kaons, pions from D^* mesons, and high-momentum charged particles, while the B_- states were reconstructed from several CP -odd states in addition to the $J/\psi K_s$ mode. K_L^0 mesons passed through the trackers undetected, so $J/\psi K_L^0$ states were reconstructed with information from the decay product appearances in the outer detectors and the information from the other particles in the B decay.

After detecting and identifying the mesons, the experimenters determined the proper time difference between the decay of the two B states by determining the energy of each meson and measuring the separation of the two meson decay vertices along the e^+e^- beam axis. When time-reversed pairs were compared, the BaBar collaboration found discrepancies in the decay rates. The asymmetry, which could only come from a T transformation and not a CP violation, was significant, being fourteen standard deviations away from time invariance. Thus the long wait for an unequivocal time-reversal violation in particle physics is finally over.

References

- [1] J. P. Lees *et al.* (The BABAR Collaboration), “Observation of Time-Reversal Violation in the B^0 Meson System,” *Phys. Rev. Lett.* **109**, 211801 (2012).
- [2] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, and R. P. Hudson, “Experimental Test of Parity Conservation in Beta Decay,” *Phys. Rev.* **105**, 1413 (1957).
- [3] J. H. Christenson, J. W. Cronin, V. L. Fitch, and R. Turlay, “Evidence for the 2π Decay of the K^0 Meson,” *Phys. Rev. Lett.* **13**, 138 (1964).
- [4] A. Angelopoulos *et al.* (CLEAR Collaboration), “First Direct Observation of Time-Reversal Non-invariance in the Neutral-Kaon System,” *Phys. Lett. B* **444**, 43 (1998).
- [5] E. Abouziad *et al.*, “Precise Measurements of Direct CP Violation, CPT Symmetry, and Other Parameters in the Neutral Kaon System,” *Phys. Rev. D* **83**, 092001 (2011).
- [6] J. Bernabeu, F. Martinez-Vidal, and P. Villanueva-Perez, “Time Reversal Violation from the Entangled $B_0\bar{B}_0$ System,” *J. High Energy Phys.* **1208**, 064 (2012).
- [7] B. Aubert *et al.*, “The BABAR Detector,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A* **479**, 1 (2002).

6 Lösung der Dirac-Gleichung mit Zentralpotential

Betrachte ein Spin 1/2 Teilchen mit Masse m , Ladung e (z.B. Elektron $m = m_e$, $e = -e_0$) in einem statischen Zentralfeld mit $\vec{A} = 0$, $V(r) = e\phi(r)$ potentielle Energie. (Beispiel: H-Atom $V(r) = -\frac{e^2}{r}$)

In der DE für den statischen Fall,

$$H_D \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}); \quad \psi \text{ 4-komp. Spinor}$$

ist dann der Dirac-Operator

$$H_D = c \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m c^2 + V(r)$$

Lösung der DE durch Trennung der Variablen. Dazu: Suche Operatoren, die mit H_D vertauschen, so dass sie „guten“ Quantenzahlen entsprechen.

In der **nichtrelativistischen** Theorie kommutiert der Hamilton-Operator

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$$

eines spinlosen Teilchens der Masse m im Zentralfeld $V(r)$ mit jeder kartesischen Komponente des Drehimpulsoperators,

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \quad \text{und mit } L^2.$$

$\Rightarrow \exists$ simultane Eigenzustände der Operatoren H , L^2 , L_z mit Eigenwerten E , $l(l+1)\hbar^2$, $m_l\hbar$.

In der Dirac-Theorie kommutieren jedoch weder $\vec{L}$ noch L^2 mit H_D ; vielmehr ist

$$[H_D, \vec{L}] = -i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p})$$

und analog für den Spin-Operator mit

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}; \quad S^2 \psi = s(s+1)\hbar^2 \psi, \quad s = \frac{1}{2}$$

S_x , S_y , S_z haben je zwei mögliche Eigenwerte $\pm \frac{\hbar}{2}$. Die kartesischen Komponenten von $\vec{S}$ vertauschen jeweils mit dem kartesischen Komponenten von $\vec{L}$, und

$$[H_D, \vec{S}] = i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p})$$

Der Gesamtdrehimpuls-Operator ist $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, mit den üblichen Drehimpuls-Vertauschungsregeln, und

$[J^2, \vec{J}] = 0$: J^2 kommutiert mit jeder kartesischen Komponente von $\vec{J}$.

$\Rightarrow \exists$ simultane Eigenfunktionen von J^2 , und einer Komponente von $\vec{J}$, die wir als J_z wählen. $\vec{J}$ kommutiert auch mit dem Dirac-Hamiltonian,

$$[H_D, \vec{J}] = [H_D, \vec{L}] + [H_D, \vec{S}] = 0$$

(d.h. jede kartesische Komponente von $\vec{J}$ kommutiert mit dem Dirac-Hamiltonian), sowie $[H_D, J^2] = 0$.

$\Rightarrow \exists$ **simultane Eigenzustände** von H_D , J^2 und J_z mit den **Eigenwerten** E , $j(j+1)\hbar^2$, $m_j\hbar$.

Auch der Operator

$$\kappa = \frac{\beta}{\hbar^2} \left(J^2 - L^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) \text{ kommutiert mit } H_D,$$

(siehe B.H. Bransden & C.J. Joachain, Quantum Mechanics, Prentice Hall 2000, pp. 704)

sowie auch der Paritätsoperator P ,

$$P \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \text{ mit 2-komponentigen Spinoren } \psi_A, \psi_B.$$

$\Rightarrow \psi$ ist simultane Eigenfunktion von H_D , P , J^2 , J_z und κ .

Simultane Eigenfunktionen der Operatoren L^2 , S^2 , J^2 und J_z sind die „Spin-Winkelfunktionen“ $Y_{ls}^{jm_j}$, mit der Parität $(-1)^l$. Es ist

$$\psi_A \propto y_{l, \frac{1}{2}}^{jm_j}$$

$$\psi_B \propto y_{l', \frac{1}{2}}^{jm_j}, \quad l' = l \pm 1 \quad \Rightarrow \begin{cases} l = j - \frac{1}{2} & \leadsto l' = j + \frac{1}{2} \\ l = j + \frac{1}{2}, & \leadsto l' = j - \frac{1}{2} \end{cases}$$

und wir können für ψ den Lösungsansatz machen

$$\psi_{E\kappa m_j} = r^{-1} \begin{pmatrix} P_{E\kappa}(r) y_{l, \frac{1}{2}}^{jm_j} \\ i Q_{E\kappa}(r) y_{l', \frac{1}{2}}^{jm_j} \end{pmatrix}$$

mit den Radialfunktionen $P_{E\kappa}(r)$, $Q_{E\kappa}(r)$.

(Der Faktor i sorgt für reelle Radialgleichungen für $P_{E\kappa}$, $Q_{E\kappa}$). Nach einigen Rechenschritten erhält man gekoppelte DGLn 1.Ordnung für die Radialgleichungen,

$$\left[\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right] P_{E\kappa}(r) = \frac{E + mc^2 - V(r)}{\hbar c} Q_{E\kappa}(r),$$

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right] Q_{E\kappa}(r) = \frac{E - mc^2 - V(r)}{\hbar c} P_{E\kappa}(r)$$

analog zur radialen Schrödinger-Gleichung in der nichtrelativistischen Theorie. Durch Eliminieren von $Q_{E\kappa}(r)$ folgt eine DGL 2.Ordnung für $P_{E\kappa}(r)$,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{A'}{A} \frac{d}{dr} + \left(AB + \frac{A'}{A} \frac{\kappa}{r} - \frac{\kappa(\kappa-1)}{r^2} \right) \right] P_{E\kappa}(r) = 0$$

mit

$$A(r) = \frac{E + mc^2 - V(r)}{\hbar c}, \quad A' = \frac{dA}{dr}$$

$$B(r) = \frac{E - mc^2 - V(r)}{\hbar c}$$

Für das Coulombproblem in wasserstoff-ähnlichen Atomen mit Potential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{Z\alpha}{r}$$

lassen sich die gekoppelten Gleichungen schreiben als

$$\left[\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right] P_{E\kappa}(r) = \left[\frac{mc}{\hbar} \left(1 + \frac{E}{mc^2} \right) + \frac{Z\alpha}{r} \right] Q_{E\kappa}(r)$$

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right] Q_{E\kappa}(r) = \left[\frac{mc}{\hbar} \left(1 - \frac{E}{mc^2} \right) - \frac{Z\alpha}{r} \right] P_{E\kappa}(r)$$

Übergang zu neuen Variablen

$$\varrho = r \cdot v$$

$$v = \frac{mc}{\hbar} \left(1 - \frac{E^2}{m^2 c^4} \right)^{1/2}$$

⇒ gekoppelte Gleichungen

$$\left[\frac{d}{d\varrho} - \frac{\kappa}{\varrho} \right] P_{E\kappa}(\varrho) = \left[\frac{mc}{v\hbar} \left(1 + \frac{E}{mc^2} \right) + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] Q_{E\kappa}(\varrho)$$

$$\left[\frac{d}{d\varrho} + \frac{\kappa}{\varrho} \right] Q_{E\kappa}(\varrho) = \left[\frac{mc}{v\hbar} \left(1 - \frac{E}{mc^2} \right) - \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] P_{E\kappa}(\varrho)$$

Asymptotisches Verhalten für $\varrho \rightarrow \infty$:

$$\frac{d}{d\varrho} P_{E\kappa}(\varrho) = \left[\frac{mc}{v\hbar} \left(1 + \frac{E}{mc^2} \right) \right] Q_{E\kappa}(\varrho)$$

$$\frac{d}{d\varrho} Q_{E\kappa}(\varrho) = \left[\frac{mc}{v\hbar} \left(1 - \frac{E}{mc^2} \right) \right] P_{E\kappa}(\varrho)$$

Da wir nach gebundenen Zuständen suchen, müssen $P_{E\kappa}(\varrho)$ und $Q_{E\kappa}(\varrho)$ für $\varrho \rightarrow \infty$ verschwinden; die asymptotischen Gleichungen sind dann erfüllt für

$$P_{E\kappa}(\varrho) = a_1 e^{-\varrho}$$

$$Q_{E\kappa}(\varrho) = a_2 e^{-\varrho}$$

$$\text{mit } \frac{a_1}{a_2} = - \left(\frac{1 + E/mc^2}{1 - E/mc^2} \right)^{1/2}$$

Wir suchen deshalb nach Lösungen der gekoppelten Gleichungen in der Form

$$P_{E\kappa}(\varrho) = N \left(\frac{1 + E/mc^2}{1 - E/mc^2} \right)^{1/2} e^{-\varrho} f(\varrho)$$

$$Q_{E\kappa}(\varrho) = N \left(\frac{1 - E/mc^2}{1 + E/mc^2} \right)^{1/2} e^{-\varrho} g(\varrho),$$

mit einer Normierungskonstante N ; für $\varrho \rightarrow \infty$ muss gelten $f(\varrho), g(\varrho) \rightarrow 1$.

Die Radialfunktionen werden als Reihenentwicklungen angesetzt,

$$f(\varrho) = \varrho^s \sum_{k=0}^{\infty} c_k \varrho^k, \quad c_0 \neq 0$$

$$g(\varrho) = \varrho^s \sum_{k=0}^{\infty} d_k \varrho^k, \quad d_0 \neq 0.$$

Einsetzen in die Radialgleichungen und Koeffizientenvergleich ergibt eine Folge von Gleichungen; aus der ersten folgt die Relation

$$s = \pm (\kappa^2 - Z^2 \alpha^2)^{1/2}.$$

Damit die Radialfunktionen am Ursprung $\varrho = 0$ regulär bleiben, muss das positive Vorzeichen gewählt werden.

Die folgenden Gleichungen ergeben Rekursionsrelationen für die Koeffizienten $c_1, d_1, \dots, c_n, d_n, \dots$

Um die asymptotische Randbedingung zu erfüllen, dass $P_{E\kappa}(\varrho)$ und $Q_{E\kappa}(\varrho)$ im Unendlichen verschwinden, müssen die Reihenentwicklungen abbrechen. (Argumentation wie in der nichtrelativistischen Theorie, und in der Klein-Gordon-Theorie).

Dies ist nur für bestimmte Energiewerte möglich: die Dirac-Energiewerte

$$E_{nj}^D = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - j - \frac{1}{2} + [(j + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2]^{1/2}} \right)^2 \right]^{-1/2}$$

Durch Entwicklung nach $(Z\alpha)^2$ folgt

$$E_{nj}^D = mc^2 \left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right]$$

und nach Subtraktion der Ruheenergie mc^2 erhält man die Energieeigenwerte

$$E_{nj} = E_{nj}^D - mc^2 =$$

$$E_{nj} = -E_n^{(0)} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right]$$

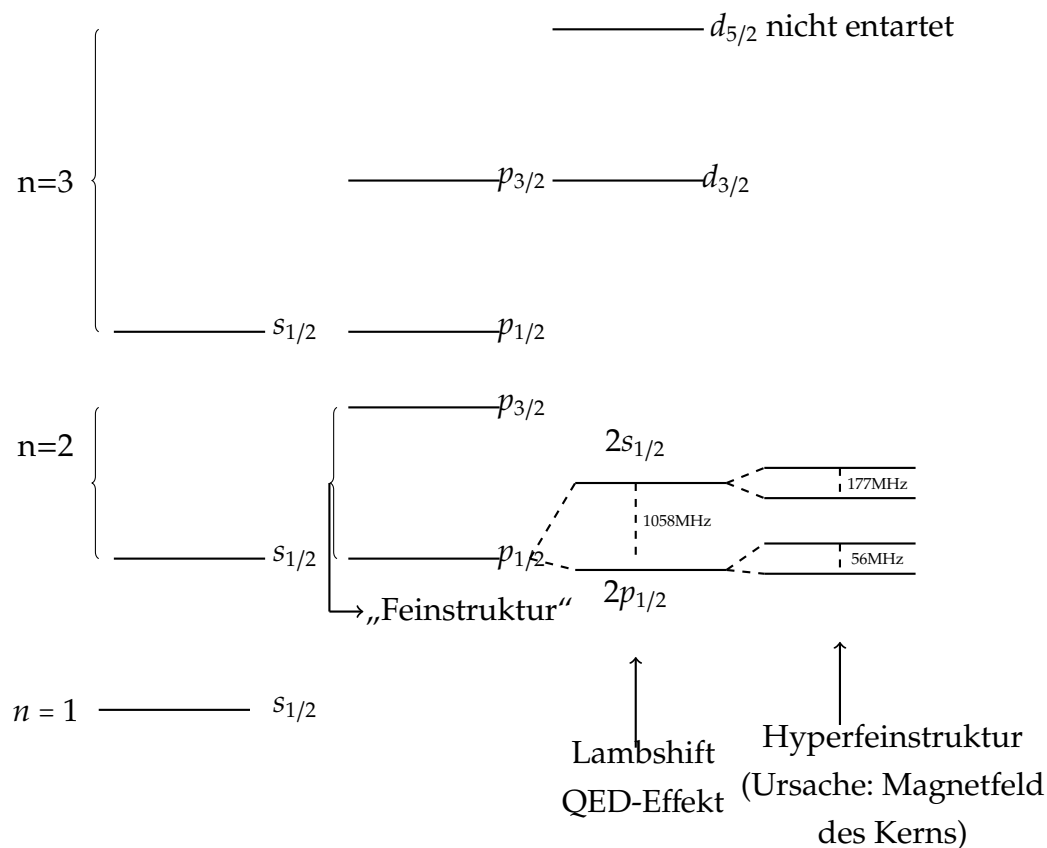
mit dem nichtrelativistischen Schrödinger-Energieeigenwert $E_n^{(0)}$,

$$E_n^{(0)} = \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{2n^2},$$

der nur von der Hauptquantenzahl n abhängt. In der **Dirac-Theorie** spalten diese Niveaus in eine **Feinstruktur** von n unterschiedlichen Niveaus E_{nj} auf, (mit $j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$) - als Folge der relativistischen Effekte.

In der Dirac-Theorie sind zwei Niveaus mit **gleichen** (n, j) auch dann entartet, wenn sie unterschiedlichen Bahndrehimpuls haben ($l = j \pm 1/2$: z.B. $2s_{1/2}, 2p_{1/2}$). Die einzigen nichtentarteten Niveaus sind $1s_{1/2}, 2p_{3/2}, 3d_{5/2}$, usw.

Termschema von Wasserstoff (nicht maßstabgerecht)



Beim gebundenen Elektron ergeben sich relativistische Korrekturen zu $g_e^{Dirac} = 2$ für das freie Elektron, die G.Breit erstmals 1928 berechnet hat, sowie QED Korrekturen (aufgrund der Bindung).

Die Dirac-Theorie wurde in zahlreichen spektroskopischen Untersuchungen an Wasserstoff und Wasserstoff-ähnlichen Ionen (vor allem He^+) getestet. Man fand 1937/38 experimentelle Anzeichen, dass die $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ Niveaus nicht exakt übereinstimmen; aber durch die Doppler-Verbreiterung der Niveaus blieb die Lage unklar. Erst 1947 konnten W.E. Lamb und R.C. Retherford („Fine Structure of the Hydrogene Atom by a Microwave Method“, Phys. Rev. 72, 241 (1947)) mit Mikrowellen-Techniken einen Radiofrequenz-Übergang zwischen $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ induzieren, und die „Lamb-Verschiebung“ von 1058 MHz bestimmen: Ausgangspunkt der Entwicklung der Quantenelektrodynamik (QED), eine der erfolgreichsten physikalischen Theorien.

Bestimmung der Lambshift (nichtrelativistische Approximation)

Die kleine Differenz der $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ Energieniveaus von ≈ 1058 MHz im H-Atom heisst nach Willis Lamb (1913-2008) Lambshift. Nach Dirac sollten beide Niveaus die gleiche Energie haben, während die Wechselwirkung zwischen Elektron und Vakuum eine Verschiebung bewirkt. Die Messung (1947) der Verschiebung durch Lamb und Retherford war der Auslöser für die Entwicklung der Renomierung im QED-Rahmen durch Schwinger, Feynman und Dyson.

Hans Bethe gab 1947 eine (die erste) heuristische Ableitung der Lambshift, die folgende Darstellung beruht auf M.O. Scully & M.S. Zubairy, „Quantum Optics“, CUP 1997 (of H.A.Bethe, Phys. Rev. 72, 339 (1947)).

Die mit dem Vakuum assoziierten **Fluktuationen des elektrischen und magnetischen Feldes** „stören“ das Coulombpotential des Kern, in dem sich das Elektron bewegt. Dadurch fluktuiert auch die räumliche Position des Elektrons, und erklärt so indirekt die Energieverschiebung.

Die dadurch hervorgehende Differenz der potentiellen Energie ist

$$\Delta V = V(\vec{r} + \delta\vec{r}) - V(\vec{r}) = \delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V + \frac{1}{2} (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla})^2 V(\vec{r}) + \dots$$

Die Fluktuationen sind isotrop,

$$\langle \delta\vec{r} \rangle_{\text{vac}} = 0$$

$$\langle (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla})^2 \rangle_{\text{vac}} = \frac{1}{3} \langle (\delta\vec{r})^2 \rangle_{\text{vac}}$$

und wir erhalten für die mittlere Differenz der potentiellen Energie

$$\langle \Delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle (\delta\vec{r})^2 \rangle_{\text{vac}} \left\langle \nabla^2 \left(\frac{-e^2}{r} \right) \right\rangle$$

Die klassische Bewegungsgleichung für die Elektronen-Fluktuationen $(\delta\vec{r})_{\vec{k}}$, die durch das Feld mit Wellenvektor $\vec{k}$ und Frequenz ω ausgelöst werden, ist

$$\boxed{m \frac{d^2}{dt^2} (\delta\vec{r})_{\vec{k}} = -e E_{\vec{k}}}$$

dabei muss die Frequenz ω größer als ω_0 im Bohr-Orbit sein,

$$\omega > \frac{\pi c}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (\omega = ck) : k > \frac{\pi}{a_0}, \quad k = (\text{Kreis-})\text{wellenzahl:}$$

(In der Spektroskopie ist $k = \frac{1}{\lambda}$, Ruhewert der Wellenlänge!) Für ein mit ω oszillierendes Feld

$$\delta r(t) \simeq \delta r(0)e^{-i\omega t} + c.c.$$

$$(\delta r)_{\vec{k}} \simeq \frac{e}{mc^2 k^2} E_{\vec{k}} = \frac{e}{mc^2 k^2} \varepsilon_{\vec{k}} \left[a_{\vec{k}} e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} + h.c. \right]$$

Summation über $\vec{k}$ ergibt

$$\langle (\delta \vec{r})^2 \rangle_{\text{vac}} = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{e}{mc^2 k^2} \right)^2 \langle 0 | (E_{\vec{k}})^2 | 0 \rangle = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{e}{mc^2 k^2} \right)^2 \cdot \varepsilon_{\vec{k}}^2$$

mit $\varepsilon_{\vec{k}} = \left(\frac{\hbar c k 2\pi}{V} \right)^{1/2}$ Da $\vec{k}$ kontinuierlich ist, wird aus der Summe ein Integral,

$$\langle (\delta \vec{r})^2 \rangle_{\text{vac}} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int dk \cdot k^2 \left(\frac{e}{mc^2 k^2} \right)^2 \frac{\hbar c k 2\pi}{V} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \int \frac{dk}{k}$$

Ohne Grenzen divergiert das Integral. Es muss jedoch gelten (s.o.) $k > \frac{\pi}{a_0}$. Ferner muss die **Wellenlänge** größer als die Compton-Wellenlänge des Elektrons sein,

$$\lambda > \lambda = \frac{\hbar}{mc}, \text{ oder } k < \frac{mc}{\hbar}$$

$$(\lambda_e = \frac{\lambda_e}{2\pi} = \frac{\hbar}{2\pi mc})$$

Dies definiert obere und untere Grenzen des Integrals,

$$\int_{\pi \cdot 4a_0}^{mc/\hbar} \frac{dk}{k} = \ln \left(\frac{mca_0}{\hbar\pi} \right) = \ln \left(\frac{mch^2}{\hbar\pi me^2} \right) = \ln \left(\frac{\hbar c}{\pi e^2} \right)$$

so dass

$$\langle (\delta \vec{r})^2 \rangle_{\text{vac}} \simeq \frac{2}{\pi} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \ln \left(\frac{\hbar c}{\pi e^2} \right)$$

Im Coulombpotential (s.o.),

$$\left\langle \vec{\nabla}^2 \left(\frac{-e^2}{r} \right) \right\rangle_{\text{at}} = -e^2 \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \left(\frac{1}{r} \right) \psi(\vec{r}) = 4\pi e^2 |\psi(0)|^2$$

(mit $\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\vec{r})$).

Für p -Orbitale verschwindet die nichtrelativistische Wellenfunktion am Ursprung, so dass es hier (im Rahmen dieser Abschätzung) keine Energieverschiebung gibt. Für s -Orbitale ist der Wert der Wellenfunktion am Ursprung

$$\psi_{2s}(0) = \frac{1}{(8\pi a_0^3)^{1/2}}$$

mit dem Bohrschen Radius $a_0 = \frac{\hbar}{me^2} \simeq 0.5 \cdot 10^{-10} \text{m} = 0.5 \cdot 10^5 \text{fm}$

$$\Rightarrow \left\langle \nabla^2 \left(-\frac{e^2}{r} \right) \right\rangle_{\text{at}} = \frac{4\pi e^2}{8\pi a_0^3} = \frac{e^2}{2a_0^3}$$

und der Unterschied in der potentiellen Energie wird

$$\begin{aligned} \langle \Delta V \rangle &= \frac{1}{6} \cdot \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \cdot \ln \left(\frac{\hbar}{\pi e^2} \right) \cdot \frac{e^2}{2a_0^3} \\ &\simeq \underbrace{0.11 \cdot \frac{1}{137}}_{119,6} \cdot \underbrace{(386 \text{fm})^2}_{3,78} \cdot \ln \left(\frac{137}{\pi} \right) \cdot \frac{1}{2 \cdot 137 (0.5 \cdot 10^5 \text{fm})^3} \\ &= 119,6 \cdot 3,78 \cdot \frac{197,32}{34,25 \cdot 10^{15}} \text{MeV} = 2603,9 \cdot 10^{-9} \text{eV} \simeq 260 \cdot 10^{-8} \text{eV} \hat{=} 629 \text{MHz} \end{aligned}$$

(Für $\ln(137)$ folgt $\langle \Delta V \rangle = 818,7 \text{MHz}$.)

Dieser Wert ist **etwa** in der Größenordnung des experimentellen Wertes von 1058 MHz (Bitte die **Vorfaktoren** nochmals prüfen).

Im Rahmen der **QED** ist die Lambshift ein 1-Loop Effekt, der durch Emission und Re-Absorption virtueller Photonen im Kernfeld zustande kommt.

Das **Feld** ist in der QED **quantisiert**, und (ähnlich wie beim harmonischen Oszillator in der QM) ist das niedrigste Energiezustand nicht bei $E = 0$: $\exists$ **Nullpunktoszillationen**, das Elektron macht rasche oszillatorische Bewegungen im Feld; es wird über einen Bereich $r + \delta r$ „verschmiert“.

In der QED wird der Ausdruck für die Lambshift bei s -Zuständen ($l = 0$)- sie werden „angehoben“, d.h. sind durch die Lambshift schwächer gebunden -

$$\Delta E_{\text{Lamb}}^{l=0} = \alpha^5 \cdot m_e c^2 \frac{k(n,0)}{4n^3}, \quad l = 0; \quad k(n,0) \simeq 13$$

und bei anderen Zuständen mit $l \neq 0$:

$$\Delta_{\text{Lamb}}^{l \neq 0} = \alpha^5 m_e c^2 \frac{1}{4n^3} \left[k(n,l) \pm \frac{1}{\pi(j + \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2})} \right], \quad l \neq 0, \quad j = l \pm \frac{1}{2}$$

Es ist

$$\Delta(2s_{1/2} - 2p_{1/2}) \begin{cases} \Delta_{\text{Lamb}}^{\text{QED}} = 1057.864 \pm 0.014 \text{MHz}, \\ \Delta_{\text{Lamb}}^{\text{exp}} = 1057.862 \pm 0.020 \text{MHz}, \end{cases} \quad \text{mit } k(n,l) < 0.05$$

Mit Hilfe der Lambshift kann die Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ auf $< 1 \text{pp}$ gemessen werden: Präzisionstest der QED.

7 Das Kleinsche Paradoxon

Wir untersuchen die Streuung von Elektronen an einem (unendlich ausgedehnten) Potentialsprung in der Dirac-Theorie. Das Problem wird zunächst im Rahmen der Einteilchen-Interpretation der DE untersucht. (Bei hinreichend hoher e^- Geschwindigkeit muss relativistisch gerechnet werden).

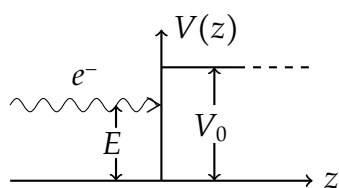
Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac.

Von O. Klein in Kopenhagen.
(Eingegangen am 24. Dezember 1928.)

Es wird die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der neuen Diracschen Dynamik untersucht. Bei sehr großen Werten des Potentialsprungs dringen der Theorie zufolge Elektronen gegen die auf sie wirkende elektrische Kraft durch die Sprungfläche und kommen auf der anderen Seite mit einer negativen kinetischen Energie an. Dies dürfte als ein besonders schroffes Beispiel der von Dirac hervorgehobenen Schwierigkeit der relativistischen Dynamik zu betrachten sein.

Einleitung. Wie Dirac¹ hervorgehoben hat, besteht eine ernste Schwierigkeit für die relativistische Quantentheorie in dem Umstand, dass ein Elektron in einem Kraftfeld nach der Theorie negative Energiewerte annehmen kann, die mit den physikalisch sinnvollen positiven Energiewerten im allgemeinen durch Übergangsmöglichkeiten verbunden sind. Auch in seiner neuen, in anderer Hinsicht so erfolgreichen Behandlung der relativistischen Quantendynamik ist es ihm nicht gelungen, diese Schwierigkeit zu überwinden. In den folgenden Zeilen soll auf ein elementares Beispiel hingewiesen werden, wo diese Schwierigkeit besonders schroff zum Vorschein kommt. Es handelt sich hierbei um die Reflexion und Brechung von Elektronenwellen an einer Grenzfläche, wo das elektrostatische Potential einen Sprung hat.

Eine Elektronen-Materiewelle propagiert mit Energie E längs der z -Achse und trifft auf eine Potentialstufe der Höhe $V_0 > E$. Die e^- -Geschwindigkeit ist vergleichbar mit c , $0.3c \leq v_e \leq c$.



Für das freie Elektron gilt

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 = \vec{p}^2 + m^2 c^2$$

In Gegenwart des Potentials ist

$$\left(\frac{E - V_0}{c}\right)^2 = \hat{p}^2 + m^2 c^2, \text{ mit dem Elektronenimpuls } \hat{p} \text{ im Potential}$$

Die DE ist dann (stationärer Fall) $0 = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m c + \frac{e\phi}{c}$.

$$\Rightarrow \left[\frac{E - e\phi}{c} - \beta m c \right] \psi + i\hbar \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} = 0$$

und die adjungierte Gleichung

$$\bar{\psi} \left[\frac{E - e\phi}{c} - \beta m c \right] + i\hbar \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_k} \alpha_k = 0,$$

Mit $e\phi = 0, \quad z < 0$

$$e\phi = V_0, \quad z > 0$$

und einer einlaufenden Elektronenwelle $p \uparrow \uparrow e_z$

$$\psi_i = u_i \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (pz - Et) \right\} \text{ wird für } \alpha \rightarrow \alpha_3 \text{ die DE}$$

$$\left\{ \frac{E}{c} - \alpha p - \beta m c \right\} u_i = 0 \text{ mit } E > 0 \text{ für einlaufende Wellen}$$

$$\text{mit } \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar} p \psi.$$

Die Amplitude der einlaufenden Welle ist $u_i \neq 0$, und mit $\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0$ muss gelten

$$\frac{E}{c} = \alpha p + \beta m c$$

$$\frac{E^2}{c^2} = p^2 + m^2 c^2 + \underbrace{(\alpha \beta + \beta \alpha)}_{=0} p m c$$

Der Impuls der reflektierten Welle ist $-p$, der Impuls der transmittierten Welle ist $\hat{p} \equiv \hat{p}$ (in z -Richtung) mit $\left(\frac{E - V_0}{c}\right)^2 = \hat{p}^2 + m^2 c^2$.

Für kleines V_0

$$\psi_r = u_r \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (-pz - Et) \right\}$$

$$\psi_t = u_t \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (-\hat{p}z - Et) \right\}$$

und aus der DE folgt mit $p \rightarrow -p$

$$\left\{ \frac{E}{c} + \alpha p - \beta mc \right\} u_r = 0, \text{ und mit } p \rightarrow \hat{p}$$

$$\left\{ \frac{E - V_0}{c} - \alpha \hat{p} - \beta mc \right\} u_t = 0$$

Die Gesamt-Wellenfunktion muss kontinuierlich an der Grenzfläche sein, d.h. für $z = 0$

$$u_i + u_r = u_t$$

Daraus folgt mit der Gleichung für die einlaufende Welle u_i :

$$\left(\frac{E}{c} - \alpha p - \beta mc \right) u_i = 0 \Rightarrow \left(\frac{E}{c} - \beta mc \right) u_i = \alpha p u_i$$

und mit den Gleichungen für **reflektierte** und **transmittierte** Welle

$$\left(\frac{E}{c} - \beta mc \right) u_r = -\alpha p \cdot u_r$$

$$\left(\frac{E - V_0}{c} - \beta mc \right) (u_i + u_r) = \alpha \hat{p} (u_i + u_r)$$

$$\left(\frac{E}{c} - \beta mc \right) (u_i + u_r) = \left(\frac{V_0}{c} + \alpha \hat{p} \right) (u_i + u_r)$$

sowie aus den ersten beiden Gleichungen durch Addition

$$\left(\frac{E}{c} - \beta mc \right) (u_i + u_r) = \alpha p (u_i - u_r)$$

so dass nach Gleichsetzen der linken Seiten folgt

$$\left(\frac{V_0}{c} + \alpha \hat{p} \right) (u_i + u_r) = \alpha p (u_i - u_r)$$

$$\text{oder } \boxed{\left[\frac{V_0}{c} + \alpha(p + \hat{p}) \right] u_r = - \left[\frac{V_0}{c} - \alpha(p - \hat{p}) \right] u_i}$$

Multipliziere beide Seiten mit $\frac{V_0}{c} - \alpha(p + \hat{p})$, benutze $\alpha^2 = 1$

und die Energie-Impuls-Beziehung $\left(\frac{E - V_0}{c} \right)^2 = \hat{p}^2 + m^2 c^2$; $\frac{E^2}{c^2} = p^2 + m^2 c^2$

$$u_r = \frac{(2V_0/c)(-E/c + \alpha p)}{V_0^2/c^2 - (p + \hat{p})^2} u_i \equiv r u_i$$

und analog für die adjungierte Amplitude der reflektierten Welle,

$$u_r^+ = r u_i^+$$

⇒ Wahrscheinlichkeitsdichte für die reflektierte Welle:

$$u_r^+ u_r = \left[\frac{2V_0/c}{V_0^2/c^2 - (p + \hat{p})^2} \right]^2 u_i^+ \left[-\frac{E}{c} + \alpha p \right]^2 u_i$$

Aus den Bewegungsgleichungen für u_i und u_i^+ folgt die Identität

$$cu_i^+ \alpha u_i = \frac{pc^2}{E} u_i^+ u_i$$

so dass wir die Amplitude der reflektierten Welle als Anteil R der Amplitude der einlaufenden Welle schreiben können: ($p^2 = \frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2$)

$$\begin{aligned} u_r^+ u_r &= \left[\frac{2V_0/c}{V_0^2/c^2 - (p + \hat{p})^2} \right]^2 \left[\left(\frac{E^2}{c^2} + p^2 \right) u_i^+ u_i - \frac{2Ep}{c} u_i^+ \alpha u_i \right] \\ &= \left[\frac{2V_0 m}{V_0^2/c^2 - (p + \hat{p})^2} \right]^2 u_i^+ u_i \equiv R u_i^+ u_i \end{aligned}$$

so dass R der Anteil der reflektierten Elektronen ist.

Für $V_0 = 0 \Rightarrow R = 0$; alle Elektronen „laufen durch“,

für $V_0 = E - mc^2$ (d.h. $\hat{p} = 0$) $\Rightarrow R = 1$: Alle Elektronen werden reflektiert.

Für noch größere $V_0 > E - mc^2$ wird $\hat{p}$ **imaginär**.

Wir setzen dann

$$\psi_t = u_t \exp \left[-\mu z - i \frac{E}{\hbar} t \right] \quad \text{mit } \mu \in \mathbb{R}$$

Es ist $\mu > 0$, da sonst die Dichte rechts der Barriere für $z \rightarrow \infty$ unendlich groß würde.

Andererseits ist mit

$$\begin{aligned} \psi_t &= u_t \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\hat{p} z - Et) \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{p} = i\hbar\mu} \\ u_r &= - \frac{\left(\frac{2V_0}{c} \right) \left(\frac{E}{c} - \alpha p \right)}{\frac{V_0^2}{c^2} - (p + i\hbar\mu)^2} u_i \\ u_r^+ &= - \frac{\left(\frac{2V_0}{c} \right) \left(\frac{E}{c} - \alpha p \right)}{\frac{V_0^2}{c^2} - (p - i\hbar\mu)^2} u_i^+ \\ \Rightarrow u_r^+ u_r &= u_r = - \frac{\left(\frac{2V_0}{c} \right)^2 \left(\frac{E^2}{c^2} - p^2 \right)}{\left[\left(\frac{V_0}{c} + p \right)^2 + \mu^2 \hbar^2 \right] \left[\left(\frac{V_0}{c} - p \right)^2 + \mu^2 \hbar^2 \right]} u_i^+ u_i \equiv R u_i^+ u_i \end{aligned}$$

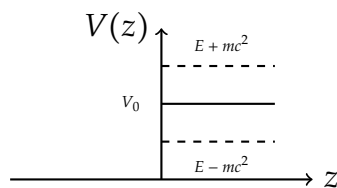
Mit den Energie-Impuls-Beziehungen

$$\left[\frac{(E - V_0)}{c} \right]^2 = \hat{p}^2 + m^2 c^2, \quad \frac{E^2}{c^2} = p^2 + m^2 c^2 \quad \text{folgt}$$

$$\hat{p}^2 = p^2 - \frac{V_0(2E - V_0)}{c^2}, \quad \text{und da } \hat{p}^2 = -\mu^2 \hbar^2$$

$$\Rightarrow \left(\frac{V_0}{c} \pm p \right)^2 + \mu^2 \hbar^2 = 2 \frac{V_0}{c} \left(\frac{E}{c} \pm p \right) \Rightarrow \boxed{R = 1}$$

$$\Rightarrow \boxed{u_r^+ u_r = u_i^+ u_i}$$



$\Rightarrow$ Für $E + mc^2 > V_0 > E - mc^2$ ist der an der Potentialschwelle reflektierte Strom ebenfalls gleich dem einfallenden. Hinter der Schwelle gibt es eine exponentiell abfallende Lösung.

Bei **anwachsendem** V_0 wird $\hat{p}$ - und damit μ wegen $\hat{p} = i\hbar\mu$ - erst größer, erreicht bei $E = V_0$ einen **Maximalwert** $\left[\text{wegen } \hat{p}^2 = p^2 - \frac{V_0(2E - V_0)}{c^2} \right]$, und fällt dann wieder ab; für $V_0 = E + mc^2$ wird $\mu = 0$.

Für $V_0 > E + mc^2$ wird $\hat{p}$ wieder reell, jedoch ist die **kinetische Energie** $E - V_0$ **hier negativ**, so dass die Region rechts der Schwelle klassisch verboten ist. Quantenmechanisch kann ein Anteil der Welle in den Potentialwall eindringen (analog zur nichtrelativistischen QM, jedoch hier bei relativistischen Energien $\Rightarrow$ anderes physikalisches Verhalten).

Bei $V_0 = E + mc^2$ war der **Reflexionskoeffizient** $R = 1$ ($\equiv$ Totalreflexion); für weiter **ansteigendes** V_0 nimmt er ab bis zum Minimalwert

$$\boxed{\alpha = R_{min} = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} R(V_0) = \frac{(E/c - p)}{(E/c + p)}}$$

und da Reflexion+Transmission (β) = 1 ergeben muss, ist der Transmissionskoeffizient β :

$$\boxed{\beta = \frac{2p}{E/c + p}} \quad (\text{prüfe: } \alpha + \beta = \frac{E/c - p + 2p}{E/c + p} = 1)$$

Für große Elektronenimpulse p kann demnach der Bruchteil der Elektronen, der durch die Grenzfläche dringt, beträchtliche Werte annehmen:

Bei einem Impuls $p = mc$, rel. Energie

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = \sqrt{2m^2 c^4} = \sqrt{2} mc^2 \simeq 1.4 \times \text{Ruheenergie}$$

$$\hat{=} \text{Elektronengeschwindigkeit } v_e = \frac{p}{E} = \frac{mc}{\sqrt{2} mc^2} \stackrel{c \equiv 1}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} = 0.71 :$$

(71% der Lichtgeschwindigkeit)

Wird der Transmissionskoeffizient

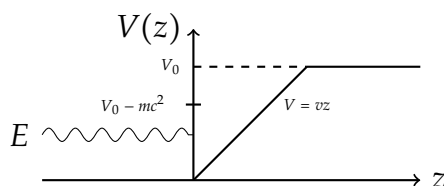
$$\beta = \frac{2p}{E/c + p} = \frac{2mc}{E/c + mc} = \frac{2}{E/(mc^2) + 1} = \frac{2}{\sqrt{2} + 1} \simeq 0.83,$$

d.h. 83% der einlaufenden Elektronen durchdringen die Potentialbarriere:

Die großen β -Werte bleiben auch dann erhalten, wenn V_0 nur einige Ruhemassen-Werte (nicht $V_0 \rightarrow \infty$) beträgt. Rechnungen von **F.Sauter** (Z.Physik 73, 547 (1931)) haben gezeigt, dass die starke Transmission nicht stattfindet (Vermutung von Niels Bohr!), wenn der Anstieg des Potentials allmählich ist, und (von $V = 0$ bis $V = V_0$) über eine Distanz von der Größenordnung der Componentenwellenlänge erfolgt, $V = vz$, $d \leq \frac{h}{mc}$.

Den in der Dirac-Theorie unerwartet großen Transmissionskoeffizienten nennt man das „kleinsche Paradoxon“. (Die erforderliche scharfe Barriere ist experimentell schwer realisierbar).

Lösung der DE mit dem Potential $V = vz$ (F.Sauter, Z.Physik 73, 547 (1931))



$$\lambda_c = \frac{h}{mc} \simeq 3.86 \cdot 10^{-13} \text{m}$$

$\Rightarrow$ DE:

$$\left\{ \gamma_1 \frac{\partial}{\partial x} + \gamma_2 \frac{\partial}{\partial y} + \gamma_3 \frac{\partial}{\partial z} + \gamma_0 \left(\frac{1}{ic} \frac{\partial}{\partial t} + \kappa vz \right) + \kappa E_0 \right\} \psi = 0$$

mit $E_0 = mc^2$, $\kappa = \frac{2\pi}{hc}$

Ansatz: $\psi = e^{\frac{2\pi i}{h}(xp_x + yp_y - Et)} \chi(z)$

$$\Rightarrow \left\{ \gamma_3 \frac{d}{dz} + \kappa \gamma_0 (vz - E) + \kappa (E_0 + ic\gamma_1 p_x + ic\gamma_2 p_y) \right\} \chi = 0$$

$\Rightarrow$ Lösung und Berechnung der Transmissionskoeffizienten siehe F.Sauter, Z.Physik 73, 547 (1931).

Für $E > v\gamma$ haben Impuls und Geschwindigkeit das gleiche Vorzeichen,
für $E < v\gamma$ das entgegengesetzte Vorzeichen (die kinetische Energie wird negativ).

Dann wird der Transmissionskoeffizient $\beta = e^{-ik^2\pi}$, und $\alpha = 1$, für $K^2 \gg 1$ bis auf Glieder höherer Ordnung in $1/K^2$.

Hier ist

$$k = \sqrt{\frac{\kappa}{v}}K, \quad K^2 = E_0^2 + c^2(p_x^2 + p_y^2)$$

$\Rightarrow$ Für alle elektrischen Felder, bei denen $K^2 \gg 1$ ist (das sind alle praktisch herstellbaren Felder) ist β verschwindend klein.

Der Wert von β hängt in erster Näherung nur von der Feldstärke (der Steilheit des Anstiegs) ab; erst für $k^2 \sim 1$ erhält man endliche Werte, entsprechend Feldern von 10^{16} Volt/cm.

Für $k^2 \simeq 1$ gilt $k^2 = \frac{2\pi}{\hbar c} \frac{(mc^2)^2}{v} \sim 1$

$$\boxed{\frac{v\hbar}{mc} \sim mc^2}$$

$\Rightarrow$ man erhält erst endliche Werte für α , wenn der Potentialanstieg $v \frac{\hbar}{mc}$ auf einer Strecke von der Comptonwellenlänge von der Größenordnung der Ruheenergie wird: derart starke Felder lassen sich bis heute nicht herstellen. (Die Bohrsche Vermutung ist damit bestätigt).

Der Grenzfall eines unendlich steilen Potentialanstiegs (O.Klein) kommt richtig heraus,

$$\beta \rightarrow \frac{2cp}{E + cp}.$$

Zum aktuellen Stand der Forschung zum Kleinschen Paradoxon siehe Dombey N.; Calogeracos A. Source: Physics Reports, Volume 315, Number 1, July 1999: „Seventy years of the Klein paradox“.